



UNIVERSIDAD  
**CARLOS III**  
DE MADRID

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS

Tesis Doctoral

---

ESTUDIO NUMÉRICO Y ASINTÓTICO DE ECUACIONES  
DE EVOLUCIÓN CON LIGADURAS INTEGRALES:  
INESTABILIDADES TIPO GUNN EN SEMICONDUCTORES  
Y FLUJOS GRANULARES

---

Pedro José Hernando Oter

Diciembre 2000



DIRECTORES

Prof. Manuel Kindelán Segura

Prof. Luis López Bonilla

# Tesis Doctoral

**Título** : Estudio Numérico y Asintótico de Ecuaciones de Evolución con Ligaduras Integrales: Inestabilidades tipo Gunn en Semiconductores y Flujos Granulares.

**Departamento** : Matemáticas

**Doctorando** : Pedro José Hernando Oter

**Directores** : Prof. Manuel Kindelán Segura  
Prof. Luis López Bonilla

## Resumen

El propósito de esta tesis, es el estudio de las ecuaciones de evolución unidimensionales, que aparecen en la teoría de las inestabilidades de diferentes sistemas físicos. Fundamentalmente, se centra en las inestabilidades producidas en diversos semiconductores como consecuencia del efecto Gunn, consistente en la generación de oscilaciones de la corriente eléctrica, en un amplio espectro de frecuencias. Los tipos de sistemas analizados se han clasificado en cuatro apartados:

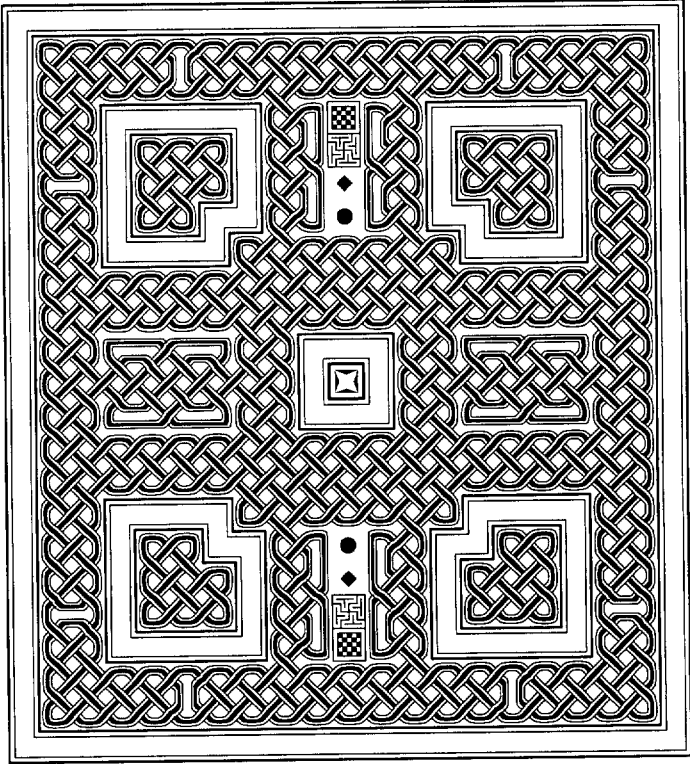
- (a) Efecto Gunn en muestras largas de germanio tipo-p ultrapuro, a bajas temperaturas.
- (b) Efecto Gunn fotorrefractivo, producido en n-GaAs al ser iluminado con dos haces de luz coherente.
- (c) Efecto Gunn en n-GaAs semiaislante, con generación de grandes oscilaciones, sobre las cuales se pueden realizar medidas experimentales precisas.
- (d) Flujo granular lento inducido por la gravedad.

Las principales aportaciones de esta memoria se pueden resumir, de forma general, en tres:

1. Desarrollo de métodos numéricos optimizados, para los diferentes sistemas estudiados.
2. Desarrollo de métodos asintóticos específicos, mediante la utilización de técnicas perturbativas, con el fin de obtener soluciones analíticas aproximadas, simples, pero precisas.
3. Desarrollo de métodos iterativos, encaminados a la obtención de coeficientes y parámetros físicos característicos de cada sistema, utilizando modelos matemáticos, simulaciones numéricas y datos experimentales.

*A mi madre Eloisa Oter.  
por toda una vida de dedicación.*

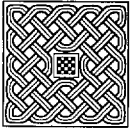




---

# Agradecimientos

---



Esta Tesis Doctoral no hubiera sido posible sin la participación de diversos colegas y sin el apoyo de amigos y familiares, a todos los cuales me gustaría nombrar aquí. En primer lugar, quiero expresar mi gratitud de forma muy especial a los Profesores Luis López Bonilla y Manuel Kindelán Segura por su dedicación, apoyo y dirección que me han prestado durante estos últimos años. En ellos no sólo he encontrado a unos excelentes científicos, sino también a unos magníficos colaboradores y amigos.

La presente memoria no es el producto de mi único trabajo, aunque cualquier error que contenga es, por supuesto, responsabilidad mía. La base fundamental de los modelos matemáticos y del análisis asintótico que aquí se presentan, fueron realizados por Luis L. Bonilla, Francisco J. Higuera y Stephen Teitsworth. Gran parte de los resultados presentados en este trabajo están realizados en colaboración con los siguientes colegas: Manuel Kindelán y Luis L. Bonilla de la Universidad Carlos III, Miguel A. Herrero, Juanjo J. L. Velázquez y Ana Carpio del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad Complutense de Madrid, César Treviño del Departamento de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México, Abraham Medina de la Subdirección de Exploración y Producción IMP. de México y Fausto Piazza de la Universidad de Nijmegen de Holanda. Tengo que agradecer la ayuda prestada en la parte numérica a Inma Cantalapiedra de la Universidad Politécnica de Barcelona y a Michael J. Bergmann de la Universidad de Duke. También mi agradecimiento hacia Miguel Moscoso y Ramón Escobedo de la Universidad Carlos III, por las fructíferas discusiones físicas que he mantenido con ellos.

A los Profesores Félix Ritort de la Universidad Autónoma de Barcelona, Luis García del Departamento de Física de la Universidad Carlos III de Madrid y a Ángel Pérez-Navarro de la Universidad Alfonso X el Sabio, por sus valiosas aportaciones a mi formación en los cursos del Doctorado.

A la Profesora M<sup>a</sup> Ángeles H. Vozmediano quiero agradecer su amistad, apoyo y simpatía, y por haber accedido a ser la lectora de esta tesis.

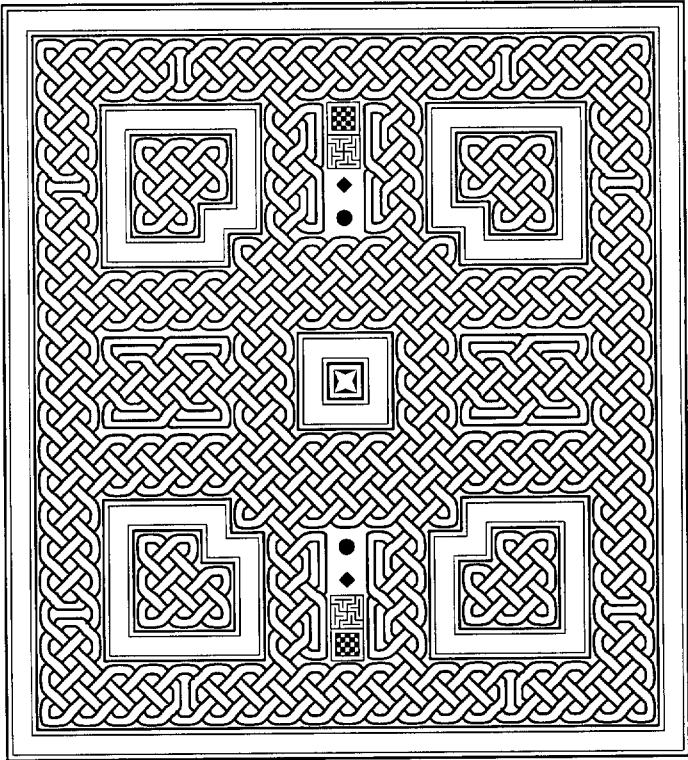
A los Profesores del Departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III de Madrid, tengo que agradecer sus enseñanzas y apoyo en estos años de Doctorado.

A todos mis estimables amigos y compañeros del Doctorado en Ingeniería Matemática de la Universidad Carlos III de Madrid, muy especialmente a Manuel Marco, Diego Álvarez, Jesús Devís, Manuel Carretero, Carlos Velasco y su mujer Ana, José A. Acebrón, Jorge Arvesú, Yuri Rodríguez, Ariel Sánchez, Francisco Padilla, Vicente Álvarez, Bernardo de la Calle, Renato Álvarez, Niurka Rodríguez, Álvaro Perales, Héctor Pijeira, Mario Guillot, Enrique Díez, Ana Foulquie, Almilcar Branchino y Esteban Moro, por los maravillosos años que he podido disfrutar a su lado.

También quiero agradecer la excepcional ayuda prestada en todos los sentidos por parte de mis amigos del Departamento de Física de la Universidad Carlos III de Madrid, Ramón M. Solís, Raul Sánchez y Antonio de Castro y a Enrique Muro del INTA.

A mi novia Ana M<sup>a</sup> de la Cruz, por su amor, dedicación y paciencia, a la hora de soportarme en el loco frenesí de la escritura de esta tesis.

Finalmente, a mis padres Antonino Hernando y Eloísa Oter, y a mi querida hermana Cristina, a los cuales les debo todo en esta vida.



---

---

# Índice General

---

---

Agradecimientos	iii
Índice de Figuras	ix
Índice de Tablas	xiii
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 Motivación de esta Tesis . . . . .	1
1.2 Formación de Patrones Lejos del Equilibrio . . . . .	2
1.3 Inestabilidades en Semiconductores . . . . .	4
1.3.1 Conductividad Diferencial Negativa . . . . .	5
1.3.2 El Efecto Gunn . . . . .	8
1.4 Organización de esta Tesis . . . . .	12
<b>2 Física del Efecto Gunn</b>	<b>15</b>
2.1 Introducción . . . . .	15
2.2 Conceptos Básicos de la Estructura de Bandas de Energía . . . . .	15
2.2.1 Expresión Matemática de las Bandas de Energía . . . . .	16
2.3 Procesos de Generación-Recombinación . . . . .	18
2.3.1 Recombinación Auger . . . . .	18
2.3.2 Generación y Recombinación banda-trampa . . . . .	19
2.3.3 Ionización por Impacto . . . . .	20
2.3.3.1 Ionización por impacto tipo banda-banda . . . . .	21
2.3.3.2 Ionización por impacto tipo banda-trampa . . . . .	21
2.4 Mecanismos de Producción de NDC . . . . .	22
2.4.1 Transferencia Intervalle . . . . .	23
2.4.2 Captura por Impurezas . . . . .	26
2.5 Factores Importantes en la NDC . . . . .	27
2.5.1 La Característica $\mathcal{V}(\mathcal{E})$ . . . . .	27
2.5.2 El Circuito Elemental . . . . .	30
2.5.3 Los Contactos . . . . .	32

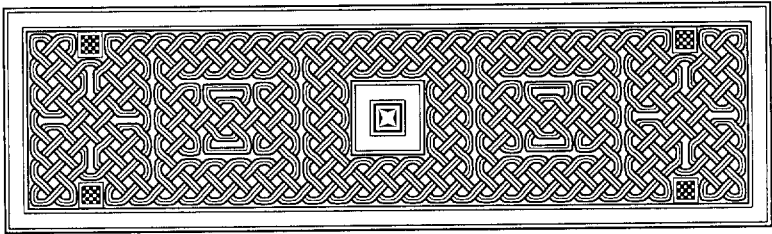
<b>3</b>	<b>Semiconductores como Sistemas Dinámicos No Lineales</b>	<b>35</b>
3.1	Introducción . . . . .	35
3.2	Ecuaciones de los Semiconductores . . . . .	35
3.2.1	Modelo de Convección-Difusión . . . . .	36
3.3	Modelo de Convección-Difusión de Kroemer . . . . .	37
3.4	Modelo Unidimensional . . . . .	39
3.4.1	Adimensionalización del Problema . . . . .	40
3.5	Estabilidad . . . . .	42
3.6	Estudio analítico . . . . .	44
3.6.1	La Regla de Áreas Iguales . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Análisis Asintótico del Efecto Gunn en Germanio tipo-p</b>	<b>49</b>
4.1	Introducción . . . . .	49
4.2	Modelo del Germanio tipo-p . . . . .	50
4.2.1	Dinámicas de Generación-Recombinación. Ecuaciones de Transporte . . . . .	50
4.2.2	Coefficientes Fenomenológicos de Transporte . . . . .	53
4.2.3	Condiciones Frontera . . . . .	55
4.3	Adimensionalización del Modelo . . . . .	57
4.3.1	Introducción . . . . .	57
4.3.2	Adimensionalización . . . . .	57
4.3.3	Ecuación Reducida . . . . .	59
4.4	Análisis Asintótico . . . . .	61
4.4.1	Solución Externa . . . . .	62
4.4.2	Soluciones Interiores . . . . .	63
4.4.2.1	Capa de Inyección . . . . .	64
4.4.2.2	Frentes de Onda Viajeros . . . . .	64
4.4.3	Poniendo Todas las Piezas Juntas . . . . .	66
4.5	Generación de Nuevas Ondas en la Capa de Inyección . . . . .	69
<b>5</b>	<b>Estudio Numérico del Problema del Efecto Gunn en el Ge tipo-p</b>	<b>75</b>
5.1	Introducción . . . . .	75
5.2	Descripción del Esquema Numérico . . . . .	77
5.3	Resultados Numéricos . . . . .	82
<b>6</b>	<b>El Efecto Gunn Fotorrefractivo</b>	<b>87</b>
6.1	Introducción . . . . .	87
6.2	El Efecto Fotorrefractivo . . . . .	88
6.2.1	Aplicaciones de la Fotorrefractividad . . . . .	88
6.2.2	Materiales Fotorrefractivos . . . . .	89
6.2.3	Física del Efecto Fotorrefractivo . . . . .	89
6.3	Ecuaciones del Modelo del Efecto Gunn Fotorrefractivo . . . . .	94
6.3.1	Adimensionalización del Modelo . . . . .	96
6.4	Análisis Asintótico . . . . .	98
6.4.1	Estado Estacionario Sinusoidal . . . . .	98
6.4.2	Frentes de Onda Viajeros . . . . .	100
6.4.2.1	Solución Externa . . . . .	100
6.4.2.2	Solución Interior: Capa de Inyección . . . . .	101



6.4.2.3	Solución Interior: Estado I . . . . .	101
6.4.2.4	Solución Interior: Estado II . . . . .	105
6.4.2.5	Solución Interior: Estado III . . . . .	107
6.4.2.6	Solución Interior: Estado IV . . . . .	109
6.5	Algoritmo Numérico . . . . .	111
6.5.1	Matrices . . . . .	111
6.5.1.1	Método de Resolución del Sistema Lineal . . . . .	112
6.5.1.2	La Matriz $T$ . . . . .	113
6.6	Resultados Numéricos . . . . .	113
<b>7</b>	<b>El Efecto Gunn en GaAs Semi-Aislante</b>	<b>125</b>
7.1	Introducción . . . . .	125
7.2	Ecuaciones del Modelo . . . . .	126
7.3	Adimensionalización y Ecuaciones Reducidas . . . . .	128
7.4	Pulsos . . . . .	131
7.5	Determinación de los Coeficientes $C_n(E)$ y $X_n(E)$ . . . . .	133
<b>8</b>	<b>Estudio Teórico del Flujo Granular Inducido por la Gravedad</b>	<b>139</b>
8.1	Introducción . . . . .	139
8.2	Desarrollo Experimental . . . . .	140
8.3	Teoría del Flujo Plenamente Desarrollado . . . . .	142
8.3.1	Teoría Simple Excluyendo la Fricción Inter-Grano . . . . .	142
8.3.2	Teoría Incluyendo la Fricción Inter-Grano . . . . .	145
8.4	Proceso de Determinación de Coeficientes . . . . .	147
8.5	Algoritmo Numérico . . . . .	148
8.6	Resultados Numéricos . . . . .	149
<b>9</b>	<b>Conclusiones y Direcciones Futuras</b>	<b>153</b>
9.1	Conclusiones . . . . .	153
9.2	Futuras Direcciones . . . . .	155
9.3	Lista de Publicaciones . . . . .	156
<b>APÉNDICES</b>		<b>157</b>
<b>A</b>	<b>Existencia y unicidad de las soluciones en el efecto Gunn en p-Ge</b>	<b>159</b>
<b>B</b>	<b>Análisis de la Estabilidad y Convergencia del Método Numérico</b>	<b>163</b>
B.1	La Matriz de Iteración . . . . .	163
B.2	El Problema Lineal . . . . .	164
B.3	El Problema no Lineal con Suaves no Linealidades Acotadas . . . . .	165
B.3.1	Resolución del Sistema no Lineal . . . . .	165
B.3.2	Unicidad y Velocidad de Convergencia . . . . .	166
B.3.3	Estabilidad y Convergencia . . . . .	167



<b>C</b>	<b>Discretización del Esquema Numérico del Efecto Gunn Fotorrefractivo</b>	<b>169</b>
C.1	Discretización . . . . .	169
C.2	Sistema de Ecuaciones del Método Numérico . . . . .	174
<b>D</b>	<b>Discretización del Esquema Numérico del Flujo Granular</b>	<b>177</b>
D.1	Discretización . . . . .	177
D.2	Sistema de Ecuaciones del Método Numérico . . . . .	178
 <b>BIBLIOGRAFÍA</b>		<b>181</b>



---



---

# Índice de Figuras

---

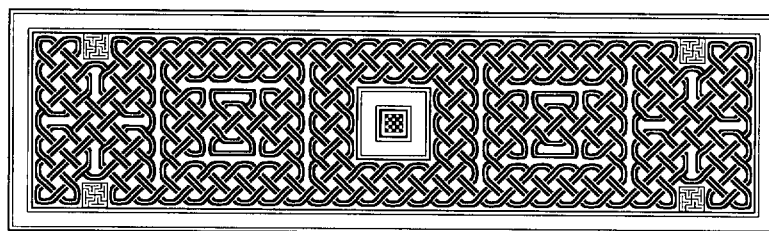


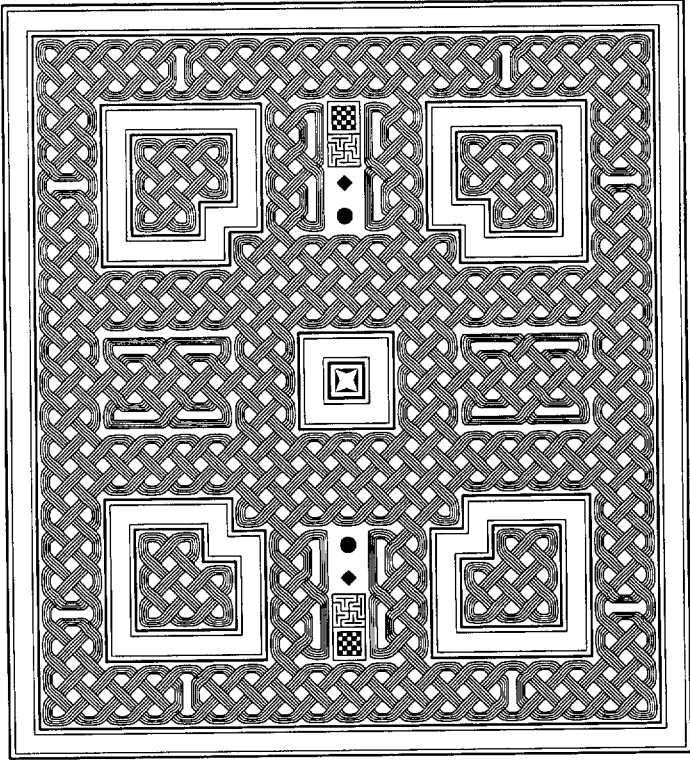
---

1.1	Ejemplos de formación de patrones clásicos. . . . .	3
1.2	Esquema de un circuito elemental con un dispositivo semiconductor. . . . .	5
1.3	Los dos tipos de conductividad diferencial negativa: NNDC y SNDC . . . . .	6
1.4	Esquema de un elemento NDC en un circuito. . . . .	7
1.5	Experimentos realizados por J. B. Gunn con GaAs en 1964. . . . .	9
1.6	Esquema del proceso global del efecto Gunn simple. . . . .	10
2.1	Modelos de generación-recombinación. . . . .	19
2.2	Modelos de ionización por impacto. . . . .	21
2.3	Esquema de la estructura de bandas del GaAs y curvas de velocidades de convección. . . . .	24
2.4	Esquema del diagrama de bandas de energía en equilibrio térmico. . . . .	26
2.5	Curva de velocidad en función del campo eléctrico para el GaAs. . . . .	28
2.6	Esquema de un circuito elemental conteniendo un elemento NDC. . . . .	31
2.7	Reordenamiento de las distribuciones de campo eléctrico en el equilibrio para contactos óhmicos. . . . .	33
3.1	Aproximaciones analíticas de las curvas de velocidad y coeficiente de difusión para el GaAs. . . . .	38
3.2	Esquema del proceso de un caso simple de inestabilidad en un semiconductor producida por NDM. . . . .	43
3.3	Curvas de la velocidad frente al campo eléctrico y del campo eléctrico frente a la distancia utilizados para demostrar la regla de las áreas iguales. . . . .	46
4.1	Diagrama de bandas del Ge tipo-p. . . . .	52
4.2	Coefficientes fenomenológicos de transporte. . . . .	55
4.3	Ciclo periódico producido en la intensidad de corriente y en la distribución del campo eléctrico. . . . .	62
4.4	Valores del campo eléctrico correspondientes a la solución externa. . . . .	63
4.5	Soluciones del sistema Ge tipo-p del tipo ondas solitarias. . . . .	65
4.6	Estados del proceso correspondientes al análisis asintótico. . . . .	67

4.7	Solución numérica del modelo reducido durante un período de la oscilación, en el caso estable del modelo de p-Ge. . . . .	68
4.8	Solución numérica del modelo reducido durante un período de la oscilación, en el caso inestable del p-Ge. . . . .	68
4.9	Comparación entre los resultados de la simulación numérica directa y la aproximación asintótica al orden dominante, para el modelo de p-Ge. . . . .	73
5.1	Funciones adimensionales, utilizadas en la modelización del efecto Gunn en el Ge tipo-p. . . . .	76
5.2	Patrón del operador en diferencias finitas utilizado en el esquema numérico. . . . .	79
5.3	Estructura del sistema de ecuaciones del modelo del Ge tipo-p. . . . .	81
5.4	Representación gráfica de los resultados numéricos de la simulación del caso estable del Ge tipo-p. . . . .	83
5.5	Representación gráfica de los resultados numéricos de la simulación del caso inestable del Ge tipo-p. . . . .	83
5.6	Espectro FFT de las series $J(t)$ en el Ge tipo-p. . . . .	84
6.1	Esquema del diagrama de bandas de energía de un cristal fotorrefractivo. . . . .	90
6.2	Formación de un patrón de interferencia en un medio fotorrefractivo. . . . .	91
6.3	Esquema del proceso de formación de patrones en el efecto fotorrefractivo. . . . .	91
6.4	Velocidad de convección del GaAs semi-aislante. . . . .	95
6.5	Resultados de la aproximación asintótica simple de primer orden. . . . .	100
6.6	Solución interior definida en el estado I. . . . .	102
6.7	Campos eléctricos $E_1$ y $E_+$ , y velocidades $c_+$ y $c_-$ de los frentes de onda, en función de la densidad de corriente $J$ . . . . .	105
6.8	Solución interior definida en el estado II. . . . .	106
6.9	Solución interior definida en el estado III. . . . .	108
6.10	Solución interior definida en el estado IV. . . . .	110
6.11	Estructura de la matriz resultante de la discretización del problema del efecto Gunn fotorrefractivo. . . . .	112
6.12	Curvas de nivel de la intensidad frente a la frecuencia directora para diferentes valores de $N_0$ en la ecuación (6.132). . . . .	115
6.13	Simulación numérica para los valores de la corriente y la frecuencia de oscilación correspondientes al punto <b>A</b> de la Figura 6.12. . . . .	116
6.14	Simulación numérica para los valores de la corriente y la frecuencia de oscilación correspondientes al punto <b>B</b> de la Figura 6.12. . . . .	117
6.15	Simulación numérica para los valores de la corriente y la frecuencia de oscilación correspondientes al punto <b>C</b> de la Figura 6.12. . . . .	118
6.16	Simulación numérica para los valores de la corriente y la frecuencia de oscilación correspondientes al punto <b>D</b> de la Figura 6.12. . . . .	119
6.17	Espectro de Fourier de la señal $j(t)$ . . . . .	121
6.18	Simulación numérica de una señal periódica correspondiente la banda <b>F</b> de la Figura 6.17. . . . .	122
6.19	Simulación numérica de una señal periódica correspondiente la banda <b>G</b> de la Figura 6.17. . . . .	123

7.1	Densidad de corriente como función del campo eléctrico y las dos primeras soluciones uniformes estacionarias $E_1(J)$ y $E_2(J)$ . Órbita homoclínica solución de (7.19). . . . .	132
7.2	Resultados experimentales disponibles, mostrados sobre la curva de densidad de corriente $J(E)$ . . . . .	134
7.3	Comparación entre las diferentes funciones estimadas de los coeficientes cinéticos del nivel EL2. . . . .	136
7.4	Resultados numéricos obtenidos en el análisis para diferentes voltajes. . . . .	137
8.1	Esquema de la geometría del silo utilizado en los experimentos realizados por Medina <i>et al.</i> [MTHB01]. Las dimensiones son, $W = 38$ cm, $H = 60$ cm, $D = 2$ cm, $b = 0.38$ cm y $\theta = 30^\circ$ . . . . .	141
8.2	Campo de las velocidades $v_x$ y $v_z$ obtenidos en los experimentos de Medina <i>et al.</i> [MTHB01] . . . . .	141
8.3	Representación gráfica de la presión adimensional $P$ , sin tener en cuenta la fricción inter-grano. . . . .	145
8.4	Esquema del proceso de discretización del problema del flujo granular. . . . .	149
8.5	Filtrado y suavizado de los datos experimentales de Medina <i>et al.</i> [MTHB01], para su tratamiento numérico. . . . .	150
8.6	Esquema del flujo de partículas, una vez realizado el filtrado y suavizado de los datos de Medina <i>et al.</i> [MTHB01]. . . . .	150
8.7	Resultados de la determinación numérica del parámetro $\beta$ , según la ecuación (8.29). . . . .	151
8.8	Resultados de la determinación numérica de los parámetros adimensionales $\alpha$ y $K$ , mediante un ajuste por mínimos cuadrados a la ecuación (8.30). . . . .	151
8.9	Resultados de la simulación numérica del proceso del flujo granular inducido por la gravedad. . . . .	152





---

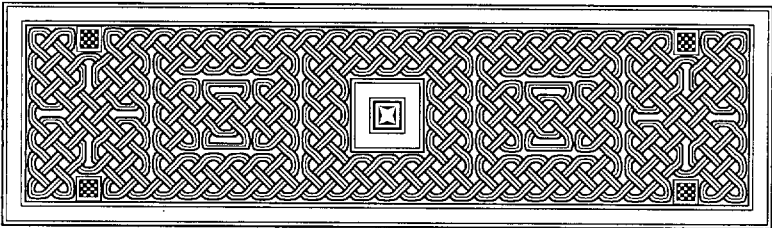
---

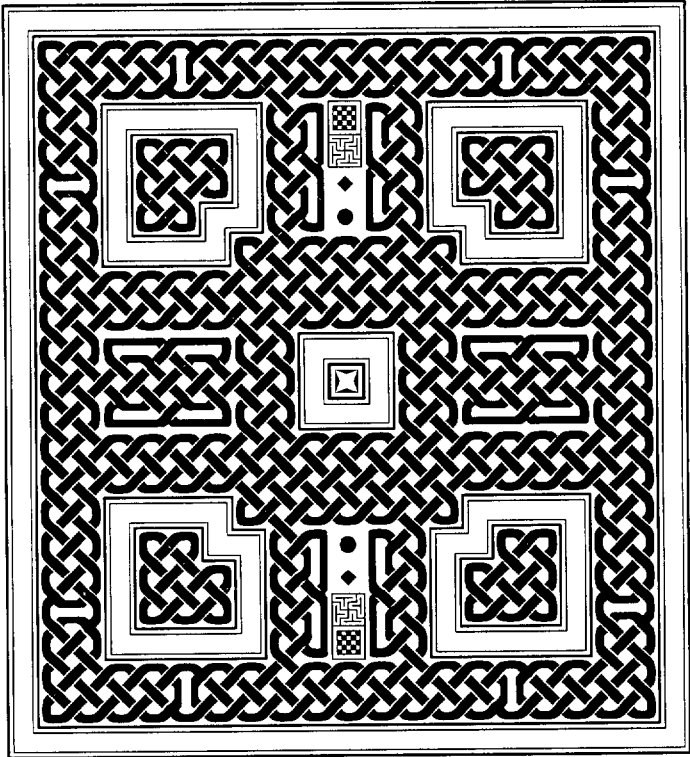
# Índice de Tablas

---

---

2.1	Parámetros relacionados con el efecto de transferencia electrónica intervale. .	30
4.1	Parámetros físicos y escalas de tiempo utilizadas en el análisis y simulación numérica del sistema p-Ge. . . . .	56
4.2	Definición de variables y parámetros adimensionales a partir de las variables dimensionales del sistema. . . . .	59
6.1	Parámetros adimensionales utilizados en la simulación numérica del efecto Gunn fotorrefractivo en el GaAs. . . . .	114

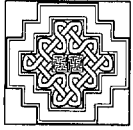






# Introducción

## 1.1 Motivación de esta Tesis



Las ecuaciones de evolución con ligaduras integrales aparecen con frecuencia en sistemas físicos de interés. En esta tesis nos vamos a centrar fundamentalmente, en el estudio de las ecuaciones de este tipo que aparecen en un fenómeno clásico dentro del amplio campo de la física de los semiconductores, como es el *Efecto Gunn*. El efecto Gunn consiste en la generación de oscilaciones de la corriente en un amplio espectro de frecuencias (microondas, etc.), en diferentes semiconductores (GaAs, p-Ge, etc), todos los cuales presentan conductividad diferencial negativa. Entre los múltiples argumentos generales que podrían darse para justificar un estudio detallado en un aspecto particular, como es éste, de los semiconductores, podemos destacar los siguientes:

1. Los semiconductores han adquirido una enorme importancia tecnológica durante las dos últimas décadas. Se utilizan para fabricar todo tipo de dispositivos electrónicos incluyendo rectificadores, transistores, fotoceldas, reguladores de voltaje, amplificadores paramétricos y dispositivos de conmutación. El conocimiento de las propiedades fundamentales del transporte electrónico en estos materiales, tiene una aplicación directa en la comprensión y el análisis del funcionamiento de todos los dispositivos con importancia técnica.
2. La tecnología del crecimiento de cristales ha hecho posible producir materiales de ciertas sustancias semiconductoras, principalmente germanio y silicio, de una pureza y perfección cristalinas fantásticas, en un grado mucho mayor de lo que se puede obtener en la actualidad con metales y aislantes. La existencia de estos cristales casi perfectos, permite al experimentador observar las propiedades de transporte electrónico y los efectos termoelectrónicos y galvanométricos con facilidad y precisión, teniendo la certeza de que lo que está tratando de observar, no lo oscurecerán los efectos provocados por impurezas o imperfecciones estructurales en la red cristalina. Por tanto, en los semiconductores se pueden observar e interpretar con facilidad los fenómenos que en otros compuestos, sería difícil o imposible medir con precisión o explicar de un modo cuantitativo.
3. El transporte carga en los semiconductores viene caracterizado por la ecuación de Boltzmann semiclásico (o por aproximaciones de tipo hidrodinámico), en dispositivos microelectrónicos cuya longitud característica excede, digamos, las décimas de micra.

Aun cuando hay dispositivos intrínsecamente cuánticos, la descripción semiclásica de los semiconductores da lugar a problemas muy interesantes aun no resueltos.

4. Desde un punto de vista matemático, los semiconductores pueden ser entendidos como sistemas dinámicos no lineales muy interesantes, ya que muestran un amplio rango de inestabilidades, restricciones y condiciones de contorno que no se encuentran, por ejemplo, en los bien conocidos sistemas fluidos.

El propósito principal de esta tesis es el estudio de las ecuaciones de evolución que aparecen en la teoría de las inestabilidades producidas en diferentes sistemas, fundamentalmente en semiconductores (germanio tipo-p y GaAs), como consecuencia del efecto Gunn, bajo diferentes condiciones. Desde un punto de vista físico del problema, nos hemos centrado en el estudio de los siguientes puntos:

- Efecto Gunn en p-Ge.
- Efecto Gunn fotorrefractivo.
- Efecto Gunn en GaAs semiaislante (SI-GaAs).
- Caos debido al efecto Gunn.

Desde un punto de vista más matemático son tratados los siguientes aspectos:

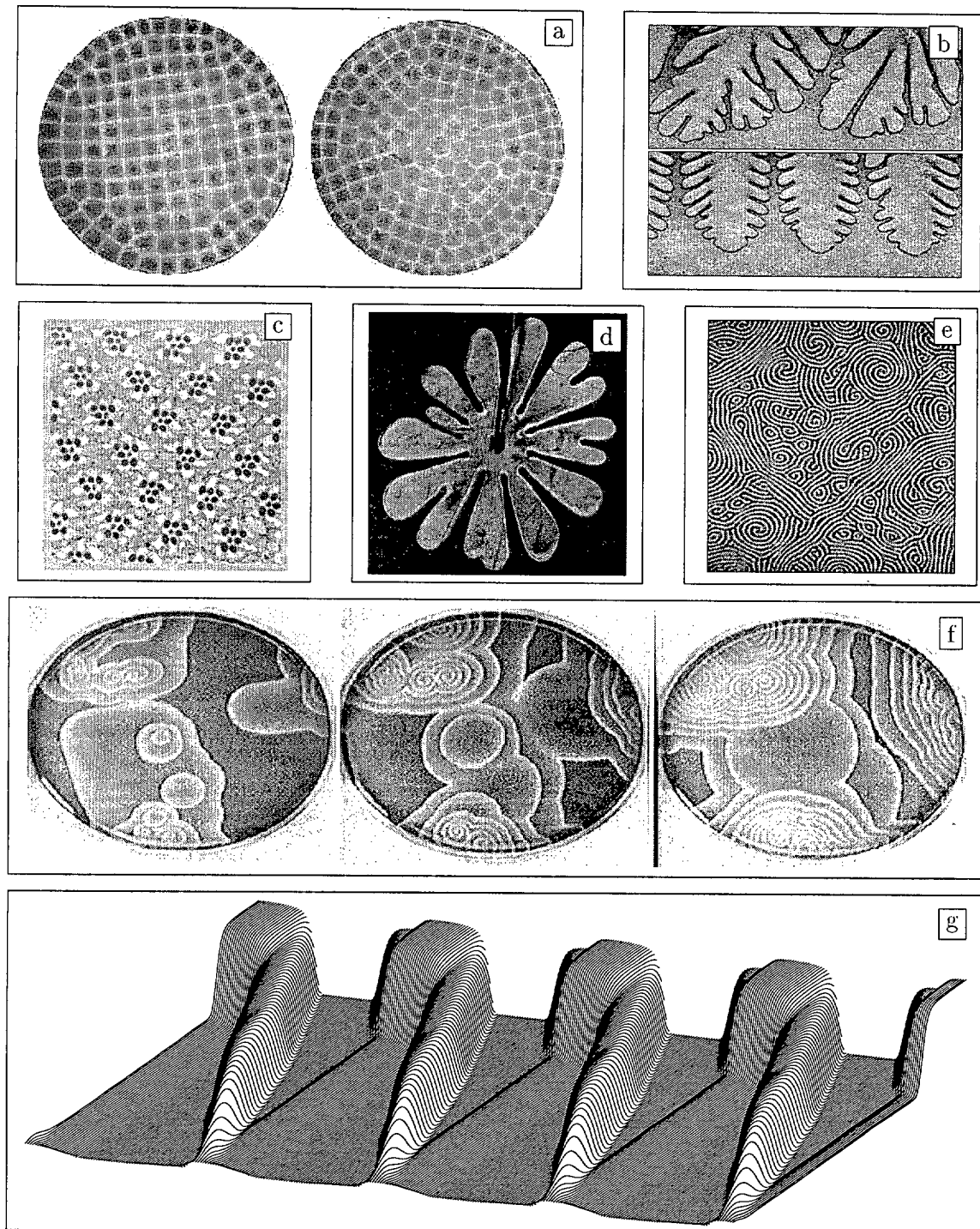
- Estudio numérico del problema directo de las ecuaciones de evolución.
- Análisis asintótico de los problemas.
- Identificación de parámetros físicos en el problema inverso.

## 1.2 Formación de Patrones Lejos del Equilibrio

Un sistema se denomina *disipativo*, si siempre que no se le aporte energía de forma continua, éste vuelve al equilibrio eliminando la energía adicional. Existen sistemas disipativos de diversa naturaleza (físicos, químicos, biológicos, etc.), que bajo condiciones externas particulares, (por ejemplo, adición de energía por encima de un determinado punto crítico), pueden permanecer en un estado de no equilibrio de forma permanente. En estos casos se pueden producir de forma espontánea *patrones* macroscópicos coherentes con estructuras generalmente no uniformes, que son conocidos bajo diferentes nombres: estructuras disipativas [NP77], sinergias [Hak93] o auto-organización [Kri84]. En la Figura 1.1 se muestran algunos ejemplos de experimentos donde se pueden observar la formación de este tipo de patrones.

Entre los ejemplos experimentales clásicos de estos sistemas podemos destacar la convección de Rayleigh-Bénard y el flujo Taylor-Couette en sistemas hidrodinámicos, el estudio de inestabilidades y patrones en láseres dentro del campo de la óptica no lineal, las reacciones oscilatorias de Belousov-Zhabotinsky en el campo de sistemas químicos y la morfogénesis (crecimiento de un organismo) y la dinámica de sistemas vivos dentro del campo de la biología [CH93].

Generalmente dichos patrones muestran diversas formas de movimiento no transitorio de tipo periódico, cuasiperiódico o caótico. Estos estados se denominan *atractores*, debido a que sometido a diferentes condiciones iniciales, dichos sistemas evolucionan (son atraídos) hacia una misma región del espacio fase (atractor).



**Figura 1.1:** Ejemplos de formación de patrones clásicos. (a) Competición de patrones con simetría cuadrada y hexagonal en problemas de convección de Bénard. (b) Formación de dendritas en la solidificación direccional de una aleación polimérica. (c) Formación de patrones en la retina de la mosca *Drosophila melanogaster*. (d) Formación de dedos viscosos radiales en la inyección de nitrógeno gaseoso en aceite mineral. (e) Formación de espirales en experimentos de convección de Rayleigh-Bénard. (f) Reacción química oscilatoria del tipo Belousov-Zhabotinsky. (g) Simulación numérica de la formación de patrones espacio-temporales del campo eléctrico en p-Ge debidas al efecto Gunn, materia de esta tesis.

A pesar de que los sistemas espacialmente extendidos pueden tener un gran número de grados de libertad, la disipación reduce de forma considerable la dimensión del atractor y, por tanto, el número de grados de libertad *efectivos* [BBJ85, GL88]. Dependiendo de la geometría del sistema y de la magnitud de la *fuerza* que mantiene al sistema en equilibrio, el número de grados de libertad efectivos puede ser pequeño ( $\sim 3$ ), comportándose como un sistema de baja dimensión. Para *fuerzas* más elevadas o bien debido a un aumento en la dimensión física del sistema, pueden producirse comportamientos muy complicados con muchos grados de libertad (caos espacio temporal) [CH93].

En esta tesis nos centraremos en el estudio de un determinado tipo de formación de patrones, que aparecen como consecuencia de las inestabilidades que se producen en diversos semiconductores.

### 1.3 Inestabilidades en Semiconductores

Cuando a un semiconductor se le somete a unas condiciones de excitación suficientemente fuertes, tales como grandes campos eléctricos o magnéticos o fuerte irradiación óptica, puede mostrar propiedades de transporte que se desvían sustancialmente de la relación lineal corriente-voltaje (*óhmica*). Los efectos que se producen como consecuencia de este cambio de propiedades se denominan *inestabilidades electrónicas* y son entre otros: oscilaciones en la corriente, discontinuidades en la relación corriente—voltaje y fenómenos de histéresis.

Muchas veces estas inestabilidades están asociadas con efectos espaciales de la carga eléctrica, en los cuales la neutralidad de la carga no se mantiene localmente. El estudio de sistemas en los que aparecen estas inestabilidades presentan, desde un punto de vista teórico, interesantes fenómenos no lineales con la formación de una gran variedad de patrones espacio-temporales, entre los que se encuentran: frentes de onda estacionarios, propagación de pulsos solitarios, estructuras con filamentos, patrones diana (*target pattern*) y ondas espirales [Nie95]. Estas inestabilidades aparecen en una amplia variedad de materiales, rangos de temperatura y condiciones de excitación [Sch87] y son debidas a diferentes procesos microscópicos tales como la ionización por impacto (Ge [TWH83, PMHP85], GaAs [AMKY83]), captura de portadores de carga por impurezas (n-Ge [RP65]), transferencia de electrones a distintos valles en la banda de conducción (*momentum-space transfer*) (GaAs [Hil62, Gun64]), transferencia espacial en heteroestructuras semiconductoras [HMSS79, KSH<sup>+</sup>81] y efecto túnel resonante de portadores en superredes [BGC<sup>+</sup>94, ZKGP97].

Aunque estas inestabilidades pueden tener un efecto nocivo en las prestaciones de los dispositivos, también se pueden utilizar intencionadamente en un gran número de dispositivos semiconductores, por ejemplo, para la generación de microondas en el rango de frecuencias entre 0.1 y 1000 GHz, para amplificación en el rango de frecuencia de los GHz donde los transistores normales no pueden ser usados y para interruptores rápidos electrónicos. Por otra parte, la extrema miniaturización de hoy en día en la tecnología de los semiconductores, (por ejemplo, los dispositivos comerciales poseen dimensiones del orden de micras), producen grandes campos eléctricos ( $\sim 10$  kV/cm) para pequeños voltajes aplicados. A menudo estos campos colocan a los dispositivos en regímenes donde las inestabilidades electrónicas y los fenómenos no lineales llegan a ser importantes. Entre los dispositivos de interés práctico que muestran este comportamiento se encuentran el diodo túnel (Esaki, 1958), diodo Gunn (Gunn, 1963), dispositivos con uniones Josephson (Josephson, 1962), diodo avalancha (Shockley, 1954), trisistor (Fulop, 1963) y diodo *p-i-n* (Prim, 1953).

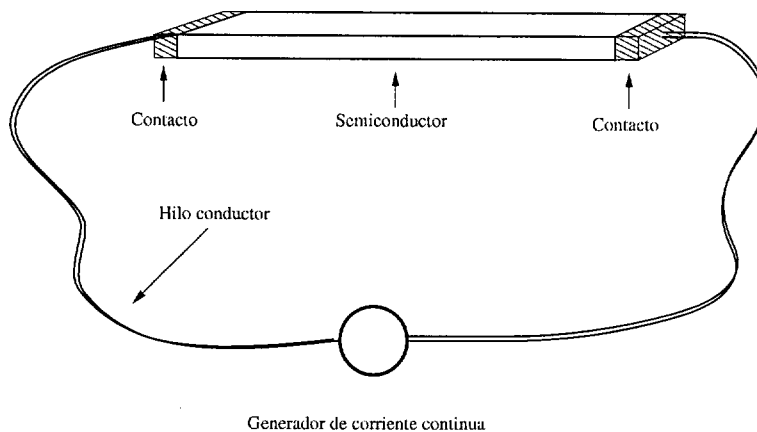


Figura 1.2: Esquema de un circuito elemental con un dispositivo semiconductor.

### 1.3.1 Conductividad Diferencial Negativa

En la Figura 1.2 se muestra de forma esquemática un circuito básico para el estudio experimental del comportamiento de un semiconductor bajo la acción de una diferencia de potencial constante entre sus extremos.

Las propiedades de transporte de un semiconductor bajo condiciones de corriente continua estacionaria, están directamente relacionadas con su característica corriente-voltaje ( $I-V$ ). Las propiedades microscópicas del material semiconductor determinan la densidad de corriente  $j$  en función del campo eléctrico local  $\mathcal{E}$  y por el tipo de contactos<sup>1</sup>. Generalmente para campos eléctricos bajos, la densidad de corriente  $j$  es directamente proporcional al campo eléctrico, de acuerdo con la ley de Ohm. Pero a medida que se aumenta dicho campo, la función  $j(\mathcal{E})$  va adquiriendo un comportamiento marcadamente no lineal. Si la característica  $j - \mathcal{E}$  tiene un régimen de conductividad diferencial,  $\sigma_{diff}$ , negativa:

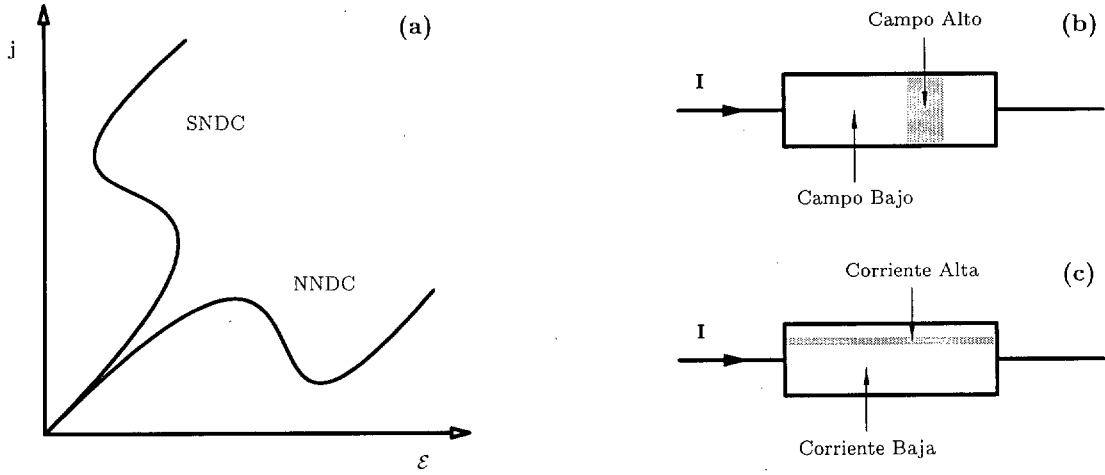
$$\sigma_{diff} \equiv \frac{dj}{d\mathcal{E}} < 0 \quad (1.1)$$

en el cual, la densidad de corriente disminuye al aumentar el campo eléctrico o viceversa, entonces, los correspondientes estados estacionarios son generalmente inestables. La conductividad diferencial negativa (en inglés *NDC*, *Negative Differential Conductivity*), puede ser clasificada en función de la forma de la característica  $j-E$  como NNDC (forma de  $\mathcal{N}$ ) o SNDC (forma de  $\mathcal{S}$ ), ver Figura 1.3-(a). Los tipos NNDC y SNDC están asociados con inestabilidades a voltaje y corriente constante respectivamente. En el caso NNDC la densidad de corriente es una función (univaluada) del campo eléctrico, pero el campo eléctrico es una

<sup>1</sup> Ya que los electrones están cargados negativamente, éstos se mueven en la dirección opuesta al verdadero campo eléctrico  $\vec{E}$ . Para evitar numerosas confusiones debidas al signo menos, en esta tesis se adoptará la convención de utilizar la cantidad:

$$\vec{\mathcal{E}} = -\vec{E}$$

en todos nuestros cálculos y referirnos a ella como el *campo eléctrico*. De esta forma, la corriente va en el sentido del movimiento de los electrones y la divergencia del campo tiene el mismo signo que la carga eléctrica. Por tanto, campo eléctrico y corriente tienen signo opuesto a los normales. Estas convenciones son habituales en tratados sobre dispositivos electrónicos [Sze81, SMSG92].



**Figura 1.3:** (a) Los dos tipos más comunes de conductividad diferencial negativa: NNDC y SNDC. (b) Formación de dominios de campo alto en el caso NNDC. (c) Formación de filamentos de corriente alta en el caso SNDC.

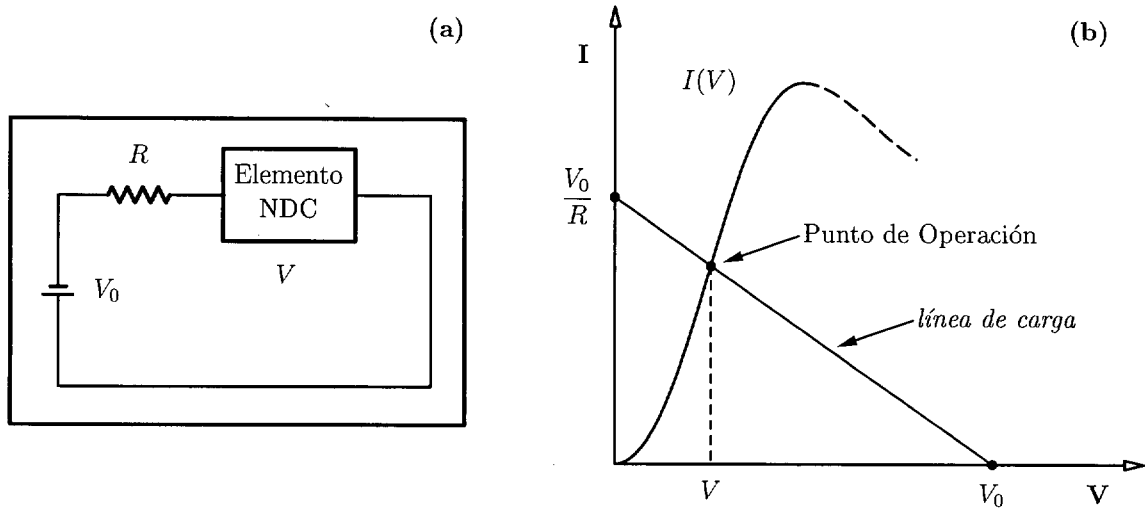
curva multivaluada de  $j$ , es decir, la relación  $\mathcal{E}(j)$  posee varias ramas en un cierto rango de  $j$ , (tres en el caso de la Figura 1.3-(a)). El caso SNDC es complementario si se intercambian los valores de  $\mathcal{E}$  y  $j$ . También pueden darse combinaciones de SNDC y NNDC más complicadas: regímenes de SNDC y NNDC pueden seguir uno a otro al aumentar el campo eléctrico [PMHP85]; la característica puede evolucionar de SNDC a NNDC en el tiempo [DAJ72] o bien la característica puede tener una forma más complicada que las simples  $\mathcal{N}$  o  $\mathcal{S}$ , estando multivaluadas tanto en  $\mathcal{E}$  como en  $j$  [Pog80, Mit77].

La conductividad diferencial negativa está asociada a la inestabilidad del *estado estacionario homogéneo*, produciendo fluctuaciones espaciales del campo eléctrico y de las densidades de carga. La consecuencia de esto, es la aparición de una distribución espacial no homogénea, de la densidad de corriente o del campo [Rid63, VK69, BBZM75]. Generalmente, aunque no siempre [Sch87], en los casos donde aparece NNDC la inestabilidad conduce a la formación de distribuciones estacionarias no homogéneas del campo, con perfiles en forma de *pulsos*, denominados generalmente “dominios de campo alto”, (Figura 1.3-(b)). Similarmente, en muchos ejemplos SNDC, el estado estacionario homogéneo se inestabiliza con la formación de distribuciones estacionarias no homogéneas de la densidad de corriente, sobre la superficie en la que fluye, con un núcleo cilíndrico de densidad de alta corriente, denominados de forma general “filamentos de corriente alta”, (Figura 1.3-(c)).

Por otra parte, la característica corriente-voltaje ( $I$ - $V$ ) de un semiconductor puede calcularse de la relación  $j - \mathcal{E}$  mediante la integración de la densidad de corriente  $j$  sobre la sección  $S$  a través de la cual fluye la corriente:

$$I = \int_S \mathbf{j} d\mathbf{S} \quad (1.2)$$

En el caso unidimensional, la integración del campo  $\mathcal{E}$  a lo largo de la longitud  $L$  (distancia entre contactos), nos proporciona la diferencia de potencial total:



**Figura 1.4:** (a) Esquema de un elemento NDC en circuito resistivo con un voltaje aplicado  $V_0$  y una resistencia  $R$ .  $V$  es la diferencia de potencial entre los extremos del elemento NDC. (b) Comportamiento del circuito. El punto de operación es la intersección entre la línea de carga y la característica  $I(V)$  del elemento NDC.

$$V = \int_0^L \mathcal{E}(x) dx \quad (1.3)$$

A diferencia de la relación  $j-\mathcal{E}$ , la característica  $I-V$  no sólo es una propiedad del material semiconductor, sino que también depende de la geometría, las condiciones frontera y del tipo de contactos específicos del sistema. Únicamente si el estado estacionario es espacialmente homogéneo y la resistencia en los contactos, (la cual en general, aun en contactos óhmicos, es fuertemente no lineal), es despreciable frente a la resistencia del bloque semiconductor, entonces las relaciones  $j-\mathcal{E}$  e  $I-V$  son idénticas.

El circuito más simple donde un elemento NDC opera se muestra en la Figura 1.4-(a). En él se encuentran dispuestos en serie una carga resistiva  $R$  con una batería de corriente continua que produce un voltaje  $V_0$ . Si  $I$  es la corriente que circula por el circuito y  $V$  es la diferencia de potencial entre los extremos del elemento NDC, entonces

$$V_0 = IR + V \quad (1.4)$$

es la ecuación de la *línea de carga*. Esta línea, con pendiente  $-1/R$ , está dibujada en la Figura 1.4-(b) y su intersección con la característica del dispositivo  $I(V)$  define el punto de operación del sistema estacionario. Los puntos de operación con conductancia diferencial negativa  $dI/dV < 0$  (correspondiente al estado estacionario homogéneo con conductividad diferencial negativa  $dj/d\mathcal{E}$ ), producen a menudo inestabilidades con la formación de campo no homogéneo o distribuciones de la densidad de corriente, (no uniformidades espacio-carga). Aunque los detalles de la naturaleza de estas inestabilidades dependen del mecanismo particular de NDC, (los cuales se verán en el Capítulo 2), algunos resultados pueden ser inferidos de la forma de la característica  $I(V)$ , mediante los puntos de corte de ésta y la línea de carga. Si existe una zona con  $dI/dV < 0$ , cuando se varía el voltaje aplicado, la línea de

carga se desplaza y pueden aparecer más de un punto de operación, siendo algunos estables y otros inestables. Cuando la línea de carga llega a ser tangencial a la característica (lo cual puede ocurrir dentro del régimen de  $dI/dV$  negativa), terminan coincidiendo dos puntos de operación y, al seguir variando  $V_0$ , desaparece: este es el caso más simple de una *bifurcación*. Generalmente las bifurcaciones están íntimamente relacionadas con la pérdida o el cambio de estabilidad de diferentes ramas de soluciones. En nuestro caso esto significa que uno de los dos puntos de intersección que coinciden es estable y el otro es inestable, (aunque ambos tienen conductancia diferencial negativa  $dI/dV$ ). Así la inestabilidad de ciertas ramas de la característica  $I(V)$  muestra ser una propiedad genérica de su topología y su comportamiento de bifurcación, más que una cuestión simple del signo de  $dI/dV$ . El tema de estabilidad y bifurcación de los puntos de operación se tratará más en detalle en el Capítulo 3.

### 1.3.2 El Efecto Gunn

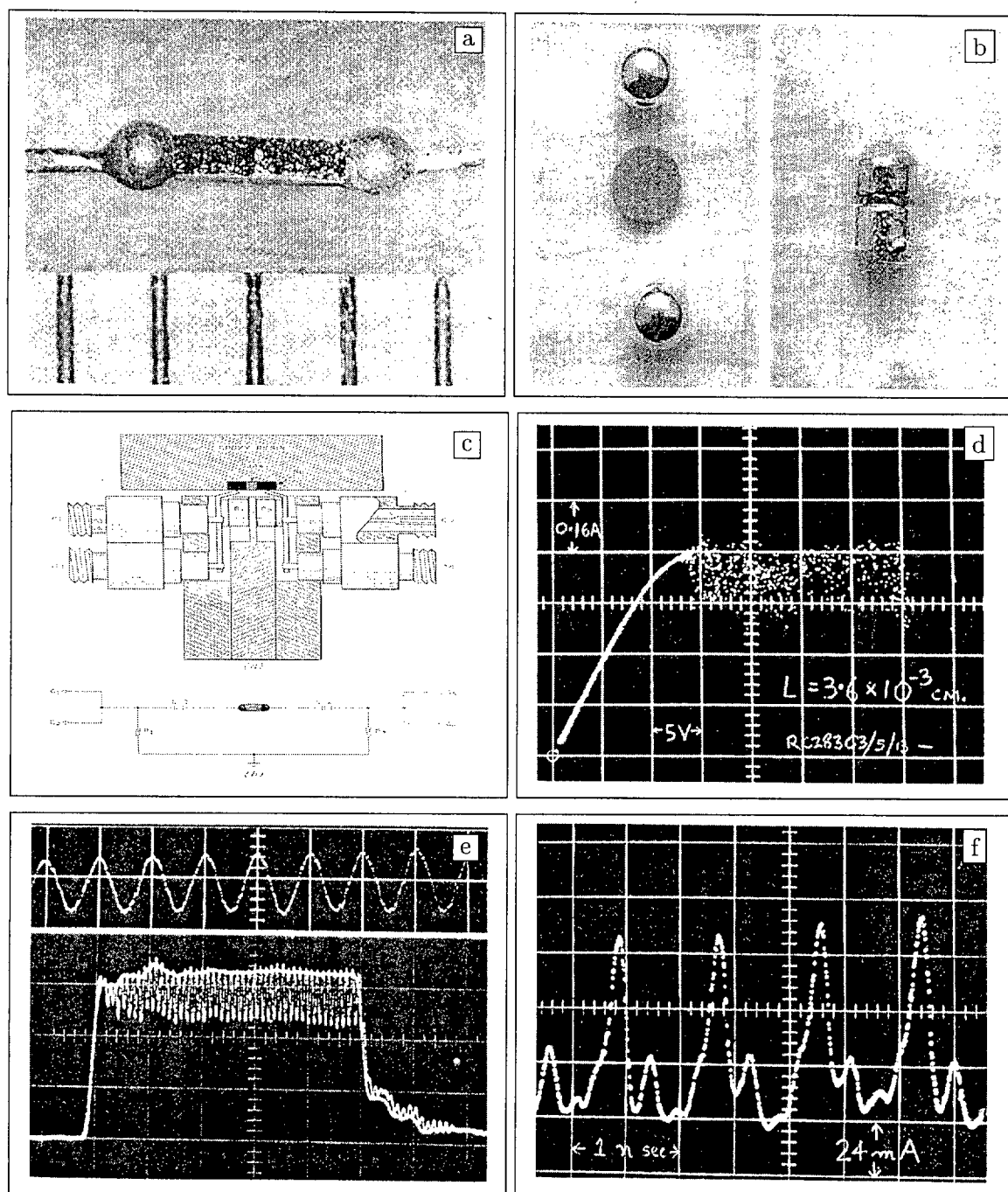
Debido a las posibles aplicaciones que presenta la conductividad diferencial negativa para osciladores y amplificadores de estado sólido, los investigadores comenzaron sobre el año 1950 la búsqueda de dicha propiedad en los semiconductores. Las primeras ideas fueron dirigidas al uso de un campo eléctrico alto, para conducir a los electrones a estados con una masa efectiva negativa, cerca de la parte alta de la banda de conducción. Si el estado de *masa negativa* estuviera suficientemente poblado, se podría producir una movilidad diferencial negativa global. Las investigaciones realizadas en la década de los 50 y principios de los 60 fueron incapaces de producir movilidad diferencial negativa.

No fue hasta 1963, cuando J. B. Gunn presentó un trabajo en la *Solid State Device Research Conference* [Gun63a, Gun63b], en el cual describía su reciente descubrimiento de oscilaciones de la corriente en la frecuencia de las microondas, en muestras de tipo-n de arseniuro de galio y fosfuro de indio, con condiciones de voltaje constante entre dos contactos metálicos situados en los extremos de la muestra. Para observar las oscilaciones se necesita un campo eléctrico medio dentro del semiconductor de unos pocos miles de voltios por centímetro. Posteriormente se observaron oscilaciones similares en otros materiales como por ejemplo, telurio de cadmio [FM66], aleaciones de arseniuro-fosfuro de galio [ASCP65] y en arseniuro de indio bajo tensión uniaxial [ASCP66].

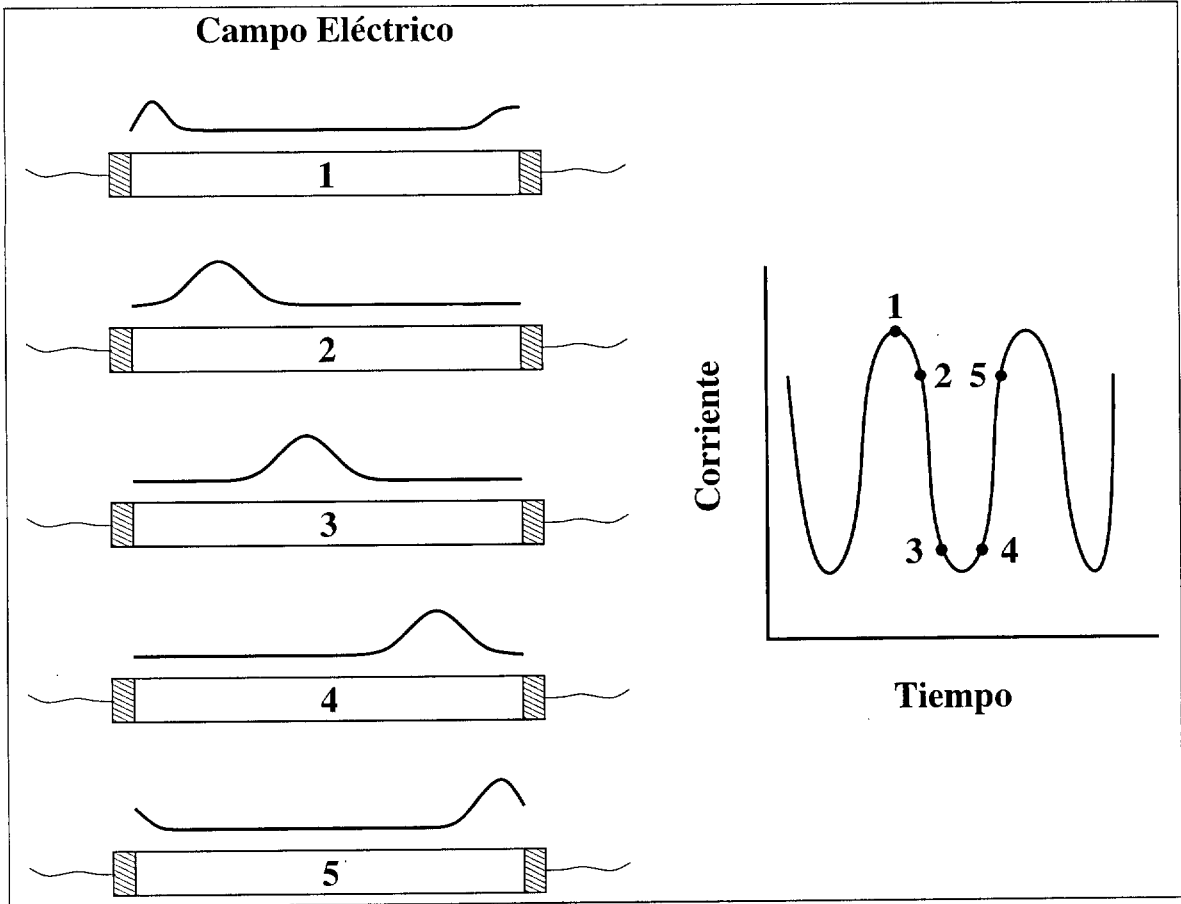
Este descubrimiento concluyó con éxito la búsqueda de evidencias de conductividad diferencial negativa en semiconductores, aunque en aquella época ni el propio Gunn ni ningún otro pareció haber reconocido esto. La explicación de la conductividad diferencial negativa en GaAs había sido publicada, como una especulación, en dos artículos de Ridley y Watkins [RW61, Rid63] y por Hilsum [Hil62] que realizó los primeros cálculos de la curva de velocidad electrónica en función del campo para el n-GaAs.

Los experimentos de Gunn, en su forma más simple, se realizaron con muestras de GaAs entre 100 y 2500  $\mu\text{m}$  de largo (ver Figura 1.5-(a) y (b)), sometidas a un voltaje constante [Gun65]. El dispositivo utilizado por Gunn en sus experimentos se muestra de forma esquemática en la Figura 1.5-(c). A campos bajos, la corriente simplemente sigue lo esperado por la ley de Ohm (Figura 1.5-(d)). Cuando el campo excede de un valor umbral sobre los 3 KV/cm, comienzan a producirse las oscilaciones de la corriente. Existe entonces un brusco salto en el valor temporal medio de la corriente y la forma de la onda consiste en un tren periódico de picos (ver Figura 1.5-(e) y (f)).





**Figura 1.5:** Experimentos realizados por J. B. Gunn con GaAs en 1964 [Gun64]. (a) Típica muestra *larga* de GaAs. Cada división de la escala inferior representa 1 mm. (b) Típica muestra *corta* de GaAs, antes (fotografía de la izquierda) y después (fotografía de la derecha) de la unión. (c) Esquema del dispositivo utilizado en la medida de las oscilaciones de corriente. (d) Característica I-V típica para n-GaAs ( $L = 3.6 \times 10^{-3} \text{ cm}$ ,  $V = 5 \text{ V}$ ). (e) Oscilaciones de la corriente típicas para ensayos con n-GaAs con  $L = 2.5 \times 10^{-3} \text{ cm}$ . En la gráfica inferior la escala temporal (horizontal) es 2 ns por cada división mayor y la escala vertical (corriente) es de 0.23 A. La gráfica superior es una ampliación con la escala temporal 0.2 ns por división. (f) Ejemplo de una oscilación de la corriente no sinusoidal.



**Figura 1.6:** Esquema del proceso global, (variación simultánea del campo eléctrico y la corriente), que tiene lugar en un caso simple del efecto Gunn. En la parte izquierda de la figura se observa la evolución espacio-temporal del campo eléctrico y en la parte derecha, la variación temporal de la corriente eléctrica. Los números que aparecen indican distintos estados temporales.

Las altas frecuencias de las oscilaciones son de orden de  $f = v/L$ , donde  $v \sim 10^7$  cm/s es la velocidad de convección de los electrones y  $L \sim 10^{-2}$  cm es la longitud del semiconductor. La existencia de esta relación implica que algo está siendo arrastrado a través de la muestra con los electrones. Realizando medidas del valor del voltaje a lo largo de la longitud de la muestra, Gunn [Gun64] y Heeks *et al.* [HWS65a, HWS65b] mostraron que lo que es arrastrado es una estrecha región de campo eléctrico alto, el cual se ha denominado *dominio de campo alto* o más simplemente “el dominio”. Los picos de la gráfica de la corriente en función del tiempo se deben a la recirculación periódica del dominio a través de la muestra. En la Figura 1.6 se muestra un esquema del proceso global que tiene lugar en el caso más simple de los experimentos. En ella se aprecian distintos estados de la evolución espacio-temporal del campo eléctrico, junto con la variación temporal de la corriente eléctrica, que de forma simultánea, tienen lugar en el dispositivo semiconductor.

Los fenómenos mostrados en los experimentos de J. B. Gunn empezaron a denominarse *efecto Gunn* [Kro64], y en la actualidad dicho término se utiliza para describir de forma colectiva, diversas clases de comportamientos de resistencia diferencial negativa en semiconductores, con una estructura de energías de banda similares a la que posee el GaAs. Cuando el mecanismo físico que da lugar a la aparición de NDC es diferente (dinámica de impurezas, efecto túnel, etc), las oscilaciones de la corriente que aparezcan se podrían denominar *efecto Gunn generalizado*.

El efecto Gunn despertó desde un primer momento un gran interés debido a su potencial para el desarrollo de osciladores simples de estado sólido de altas frecuencias, en la banda de las microondas. Desde su descubrimiento, se han llevado a cabo una gran cantidad de investigaciones tanto en los mecanismos físicos involucrados, como en las aplicaciones a dispositivos para la producción de microondas. Las características básicas del efecto son ahora conocidas y las oscilaciones producidas por GaAs utilizadas en cantidad de aplicaciones comerciales y laboratorios de investigación.

Hoy, el efecto Gunn forma la base de una nueva clase de dispositivos microelectrónicos, particularmente, para la generación de microondas. La mayoría del trabajo realizado en este campo ha sido utilizando GaAs, debido al relativo avance de la tecnología asociada con la preparación de este material. En el laboratorio, se han obtenido frecuencias de hasta 150 GHz [LKE<sup>+</sup>72]. Dispositivos con unas prestaciones más moderadas, sobre los 100 mW en la banda de rayos X, están hoy en día disponibles comercialmente, con una calidad comparable a los tubos de microondas e incluso mejores, pero con la ventaja de funcionar con un consumo de unos pocos voltios de corriente continua. Esto podría estar aun lejos de lo que parecen ser, los límites de prestaciones de estos dispositivos y quizás en los próximos años, los dispositivos comerciales basados en el efecto Gunn, contribuyan al perfeccionamiento del campo de la electrónica de microondas del estado sólido. Para ello es fundamental un conocimiento completo no sólo de la física de los procesos involucrados, sino también de la matemática que encierran dichos modelos físicos.

Aunque en la actualidad, la física del efecto Gunn se entiende bien, (ver por ejemplo [SGS79, Sch87, SMSG92]), no ocurre lo mismo con la matemática de los modelos involucrados. El primer modelo matemático capaz de explicar el efecto Gunn en n-GaAs fue propuesto en 1964 por Kroemer [Kro64] y posteriormente se entendieron aspectos importantes de su análisis, a través de trabajos de Butcher y Fawcett [BF66] y Knight y Peterson [KP66, KP67]. Por otra parte, los primeros intentos de abordar el problema desde un punto de vista numérico fueron realizados por Kroemer [Kro66] y McCumber y Chynoweth [MC66].

En los últimos años se han propuesto nuevos modelos matemáticos relativamente simples para el efecto Gunn generalizado, que contienen la física esencial del fenómeno [WT85, Tei89], y por otra parte se han realizado excelentes experimentos relacionados con el efecto Gunn [KMW91, KMW92a, PCM96]. A partir de ellos se ha dado un nuevo impulso en el conocimiento matemático del origen y propiedades de las oscilaciones de la corriente, mediante técnicas de perturbaciones singulares y de análisis asintótico [Bon91, BH91, Bon92a, BCBT94].

En esta tesis se intenta avanzar en esta última línea de investigación, por una parte, aplicando el análisis perturbativo a los modelos del germanio ultrapuro tipo p y n-GaAs en distintas condiciones, y por otra, complementándolo con simulaciones numéricas de las ecuaciones en derivadas parciales que forman los distintos modelos.

## 1.4 Organización de esta Tesis

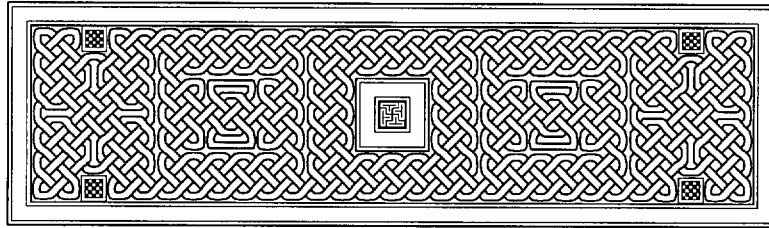
Este trabajo de investigación presenta las siguientes aportaciones:

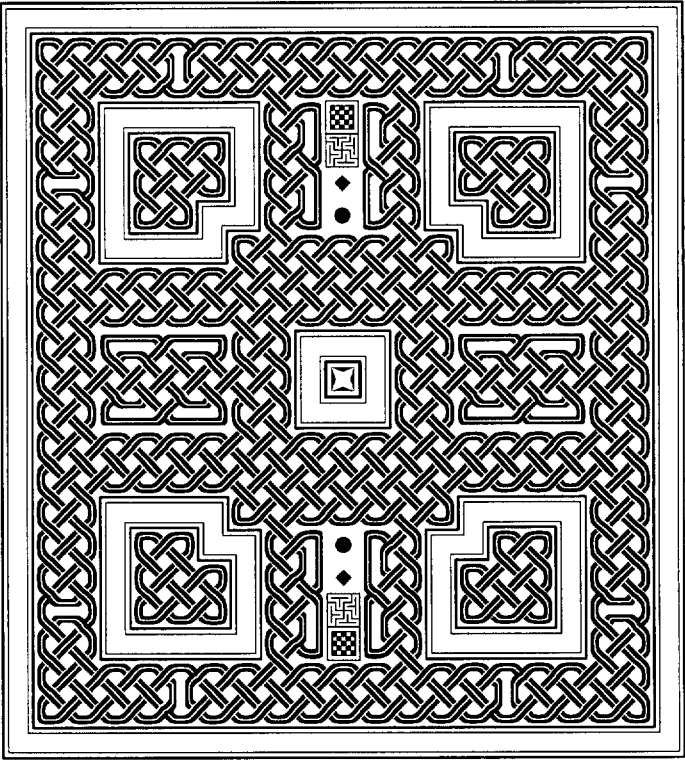
1. Avance en la utilización de técnicas perturbativas en el estudio teórico de diferentes ecuaciones de evolución con ligaduras integrales de interés práctico, fundamentalmente en las concernientes a las inestabilidades en semiconductores producidas por el efecto Gunn, así como las que aparecen en el flujo granular inducido por la gravedad.
2. Desarrollo de métodos numéricos de resolución de ecuaciones integro-diferenciales.
3. Desarrollo de métodos para la determinación de coeficientes cinéticos mediante modelos matemáticos reducidos y la utilización de datos experimentales.
4. Estudio teórico de los procesos caóticos que generan los diferentes fenómenos que tienen lugar en el efecto Gunn.

A tal fin, la organización de esta tesis es la siguiente:

- El Capítulo 2 presenta la base teórica del efecto Gunn. En él se define la física del problema, con dos de los mecanismos más importantes que explican la aparición de conductividad diferencial negativa en semiconductores: la transferencia intervalle y la captura por impurezas.
- En el Capítulo 3 se revisan los conceptos fundamentales del tratamiento de los semiconductores como sistemas dinámicos no lineales. En la primera parte se presentan los modelos matemáticos que describen los semiconductores, centrándonos en el modelo de convección-difusión. En la segunda parte, se presenta y resuelve el modelo clásico de Kroemer y se analizan distintos casos, empleándose técnicas del plano fásico con la búsqueda de puntos de bifurcación y soluciones tipo onda (órbitas homoclínicas y heteroclínicas).
- El Capítulo 4 muestra el análisis asintótico del efecto Gunn para muestras largas de germanio tipo p, simplificando el proceso en diferentes estados correspondientes a la generación, movimiento y aniquilación de las ondas solitarias. Se muestran, así mismo, diferentes simulaciones numéricas que confirman la veracidad del análisis.
- El Capítulo 5 describe un método numérico utilizado en la resolución numérica del modelo del germanio tipo-p ultra puro, tratado en el capítulo anterior. Este método numérico tiene una estructura muy similar a la que tienen los métodos numéricos que utilizaremos en el resto de los capítulos. En este capítulo se realiza un análisis de la unicidad de las soluciones, velocidad de convergencia y estabilidad y convergencia del método numérico empleado.
- El Capítulo 6 presenta y resuelve un modelo de efecto Gunn fotorrefractivo, consistente en la activación de dominios de campo alto haciendo incidir sobre el semiconductor, dos ondas ópticas de frecuencias ligeramente distintas. Se analiza la complejidad de la respuesta de dicho sistema, la cual incluye generación múltiple de ondas, aniquilación y estructuras de caos espacio-temporal. Así mismo, se realiza un análisis asintótico de las soluciones del problema en un caso sencillo.

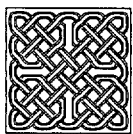
- El Capítulo 7 presenta una teoría de los dominios de campo alto en GaAs semiaislante, mediante la reducción por técnicas perturbativas de un modelo del tipo convección-difusión a una ecuación dispersiva que conserva las dos escalas temporales del problema. La utilización del modelo simplificado junto con resultados experimentales, permite desarrollar una nueva estrategia para la determinación de coeficientes cinéticos, basado en simulaciones numéricas, que ajustan de forma dinámica diferentes parámetros del modelo.
- El Capítulo 8 muestra el planteamiento de un modelo matemático para el estudio del flujo granular inducido por la gravedad. Este modelo matemático consiste de una ecuación de evolución con una restricción integral, que posee una estructura muy similar a la que aparece en los diferentes modelos del efecto Gunn, estudiados en esta memoria. En este capítulo además, se planteará un método numérico para su resolución y se aplicará a la determinación de coeficientes cinéticos del modelo.
- Finalmente en el Capítulo 9 se muestran las conclusiones de esta tesis y los temas abiertos para próximos trabajos de investigación.





# Física del Efecto Gunn

## 2.1 Introducción



El comportamiento de la conductividad diferencial negativa de los electrones en ciertos semiconductores, fundamento del efecto Gunn, es una consecuencia directa de la estructura de bandas de energía de los mismos, específicamente de la estructura de su banda de conducción. En este capítulo se describen las bases físicas que explican estos fenómenos, estructurado de la siguiente forma: en la Sección 2.2 se introducen los conceptos básicos de las bandas de energía, en la Sección 2.3 se detallan los procesos de generación-recombinación en semiconductores, en la Sección 2.4 se muestran dos mecanismos físicos de producción de NDC y por último en la Sección 2.5 se analizan los principales factores que afectan a la NDC.

## 2.2 Conceptos Básicos de la Estructura de Bandas de Energía

En un sólido, debido a la disposición periódica de los átomos, los niveles energéticos disponibles para la distribución de los electrones no son valores perfectamente definidos, sino que se ensanchan formando unas *bandas*. Mientras que los electrones que ocupan las bandas de menor energía están fuertemente ligados a los átomos, los electrones que ocupan las bandas más altas pueden moverse por todo el cristal. En un cristal con enlace iónico, incluso los electrones de mayor energía están situados en una banda en la que tienen su movimiento limitado. Esta banda se denomina *banda de valencia*. A estos electrones se les puede comunicar la energía suficiente para saltar a una banda superior permitida vacía, en donde el electrón tenga libertad para desplazarse: esta banda se denomina *banda de conducción*. En los sólidos aislantes, la energía que separa la banda de valencia de la banda de conducción es muy grande, del orden de  $\Delta E \geq 5$  eV, por lo que en condiciones normales no hay electrones en la banda de conducción. Por el contrario en los sólidos metálicos los electrones de mayor energía están situados en bandas que permiten su movimiento por todo el cristal.

En un semiconductor la distancia energética entre la banda de valencia y la de conducción es mucho menor que en un aislante; típicamente del orden de 1 eV o menor. En el estado fundamental, (a bajas temperaturas), todos los electrones seguirán estando en la banda de valencia y el semiconductor se comportará como un aislante; pero basta una cantidad de energía relativamente pequeña, (la energía de los fotones de la luz visible puede ser suficiente), para pasar electrones de una banda a otra y provocar la aparición de una corriente eléctrica, (este fenómeno físico es la base del *efecto fotoeléctrico*).

Cuando un electrón salta a la banda de conducción, deja un *hueco* en la banda de valencia a la que pertenecía y si no hay campo eléctrico externo, este hueco queda fijo en dicha banda. Pero si existe un campo eléctrico externo, los electrones y los huecos pueden desplazarse en sus respectivas bandas, lo que da lugar a movimientos espaciales que se traducen en una corriente eléctrica. El hueco se comporta como una carga positiva que se mueve en la dirección del campo eléctrico, mientras que los electrones se mueven en dirección opuesta. El proceso de *generación* de pares electrón-hueco se complementa con la posible *recombinación* de un electrón que vuelve a caer en la banda de valencia, aniquilando un hueco.

Al considerar la conductividad de un semiconductor hay que tener en cuenta los dos tipos de portadores de carga: los electrones y los huecos. Al contrario de lo que ocurre en los metales, al aplicar un campo externo en un semiconductor se puede alterar de forma considerable la concentración de portadores de carga en el material, sin introducir ninguna densidad de carga eléctrica importante, ya que los huecos y electrones aparecen a pares. La formación de estas densidades de portadores en exceso va acompañada de una modulación notable de la conductividad volumétrica del material. Esta posibilidad es la que permite el uso de elementos semiconductores como dispositivos electrónicos tales como rectificadores, transistores y unidades de conmutación.

### 2.2.1 Expresión Matemática de las Bandas de Energía

Las estructuras de banda de energía de los sólidos suele expresarse matemáticamente en términos de la dependencia funcional,  $\epsilon(\vec{k})$ , de la energía de los electrones  $\epsilon$  y de su vector de onda  $\vec{k}$ . La longitud de onda de un electrón en el vacío está dada por:

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v} \quad (2.1)$$

donde  $h$  es la constante de Planck,  $m_0$  es la masa de los electrones y  $v$  es modulo de su velocidad. Ya que la velocidad es un vector, la relación inversa entre  $\lambda$  y  $v$  hace difícil expresar la dinámica de los electrones en términos de  $\lambda$ ; por tanto, se introduce un vector de onda  $\vec{k}$ , que tienen la dirección de propagación de los electrones y cuya magnitud, (denominada número de onda), viene dada por:

$$|\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{m_0 v}{\hbar} \quad (2.2)$$

donde  $\hbar = h/2\pi$ . La energía cinética de los electrones en el vacío puede expresarse en términos de  $k$  de la siguiente forma:

$$\frac{1}{2} m_0 v^2 = \epsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.3)$$

Dentro de un sólido, los electrones se encuentran fuertemente modulados por las distribuciones periódicas de los átomos, haciendo que la relación entre  $v$  y  $\lambda$  y entre  $\epsilon$  y  $k$  sea más complicada que (2.3) y característica de cada sólido en particular.

La dinámica de los electrones dentro de un semiconductor está totalmente determinada si se conoce la relación  $\epsilon(\vec{k})$  para cada una de sus bandas de energía. Se puede demostrar [Kit93] que la velocidad del electrón está dada por:



$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k_x}, \quad v_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k_y}, \quad v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial k_z} \quad (2.4)$$

o simbólicamente,

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \epsilon \quad (2.5)$$

Bajo la influencia de un campo eléctrico los electrones libres de un sólido son acelerados. En el vacío esta aceleración estaría dada por la ley de Newton:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{e \vec{\mathcal{E}}}{m_0} \quad (2.6)$$

donde  $e$  es la carga del electrón y  $\vec{\mathcal{E}}$  es el campo eléctrico. Escrito en términos de  $\vec{k}$ , se convierte en:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = e \vec{\mathcal{E}} \quad (2.7)$$

Ya que dentro de un sólido, la ecuación (2.1) no es válida, estas dos formas de la ley de Newton no son equivalentes. Uno de los principales resultados de la física del estado sólido, establece que la forma- $k$  de la ecuación (2.7) permanece válida, mientras que la forma- $v$ , (2.6) no [Mck91]. Por tanto  $\vec{k}$  cambia de forma constante bajo la influencia de un campo constante, mientras que  $\vec{v}$  no.

Es posible expresar la ley de Newton en una forma- $v$  modificada, diferenciando (2.5) e insertando (2.7). Para la componente  $x$  se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{dv_x}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_x^2} \frac{dk_x}{dt} + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_x \partial k_y} \frac{dk_y}{dt} + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_x \partial k_z} \frac{dk_z}{dt} \right] \\ &= \frac{q}{\hbar^2} \left[ \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_x^2} \mathcal{E}_x + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_x \partial k_y} \mathcal{E}_y + \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_x \partial k_z} \mathcal{E}_z \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

y con expresiones similares para  $y$  y  $z$ . De forma vectorial queda de la forma:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{e \vec{\mathcal{E}}}{m^*} \quad (2.9)$$

donde  $m^*$  no es un escalar, si no un tensor, cuya inversa tiene las siguientes componentes tensoriales:

$$\left[ \frac{1}{m^*} \right]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} = \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k_i \partial k_j} \quad i, j = x, y, z \quad (2.10)$$

Las ecuaciones (2.9) y (2.10) indican que los electrones libres dentro de un sólido están acelerados como si fueran electrones en el vacío, pero con una *masa efectiva*  $m^*$ , la cual en general tiene carácter tensorial. En el caso del vacío  $m^*$  se reduce al escalar  $m_0$ .

## 2.3 Procesos de Generación-Recombinación

Los semiconductores de los que hemos hablado hasta ahora tienen en estado de equilibrio una densidad de electrones igual a la de huecos y se denominan *intrínsecos*. Al ser el número de portadores bastante pequeño, la conductividad, aunque variable, no es muy alta. Sin embargo las propiedades conductoras de estos materiales se pueden explotar aún más si consideramos semiconductores *extrínsecos*, que son semiconductores dopados con pequeñas cantidades de otros elementos. Estas impurezas se introducen en el interior del cristal semiconductor en la fabricación de los dispositivos mediante procesos tecnológicos muy complejos [Sel84]. Existen dos tipos de semiconductores extrínsecos: los semiconductores *tipo-n* y los semiconductores *tipo-p*. Los semiconductores tipo-n están dopados con elementos capaces de ceder fácilmente electrones, (tales como As, Sb u otros elementos pertenecientes al grupo V de la tabla periódica), de forma que el semiconductor tendrá un exceso de portadores de carga negativa. Por otra parte, los semiconductores tipo-p están dopados con elementos capaces de captar fácilmente electrones, (generalmente elementos del grupo III, como Al, Ga, In, etc.) y por tanto el semiconductor tendrá un exceso de portadores de carga positiva (huecos). En general, en los semiconductores extrínsecos el número de portadores introducidos con las impurezas es muchísimo mayor que el de portadores propios. Por esta razón los portadores introducidos en el dopaje se denominan *portadores mayoritarios*, (electrones en los semiconductores tipo-n y huecos en los semiconductores tipo-p), y son los principales responsables de la conductividad del material.

En los semiconductores extrínsecos existen otros mecanismos de generación-recombinación mucho más importantes que la simple electrón-hueco antes mencionada. En esta sección se mostrarán tres modelos que se utilizan en las ecuaciones fluido dinámicas, (ver Sección 3.3).

### 2.3.1 Recombinación Auger

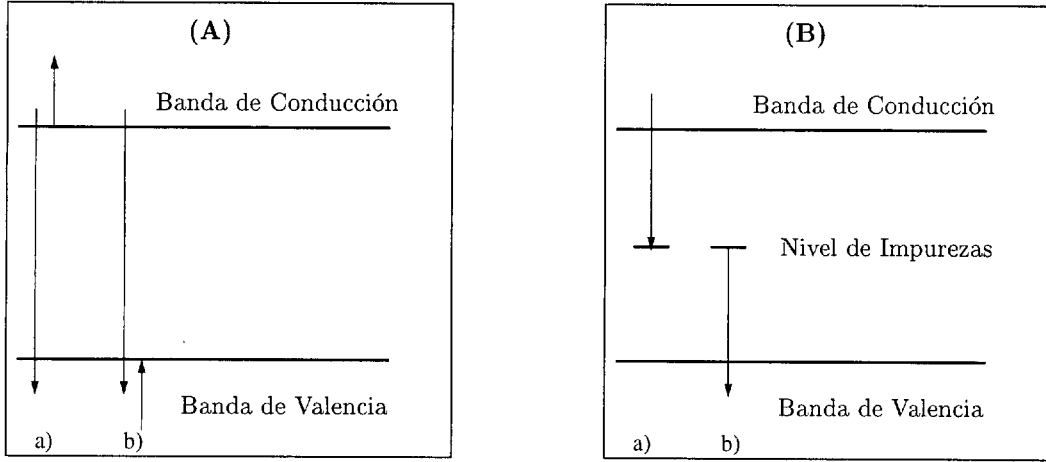
El primer mecanismo es el denominado *recombinación Auger*, que consta de dos procesos distintos esquematizados en la Figura 2.1-(A):

- a) *Recombinación (captura) de un electrón*: Un electrón se mueve desde la banda de conducción a la banda de valencia y se recombina allí con un hueco. Su energía se transfiere a otro electrón de la banda de conducción.
- b) *Recombinación (captura) de un hueco*: Un electrón se mueve de la banda de conducción a la banda de valencia y se recombina allí con un hueco. Su energía se transfiere a otro hueco en la banda de valencia.

De igual forma, existen otros dos procesos que actúan en las direcciones opuestas:

- c) *Generación (emisión) de un electrón*
- d) *Generación (emisión) de un hueco*

En modelos de tasa para densidades de portadores, las velocidades de cada uno de estos procesos se pueden obtener mediante la ley de acción de masas. En el caso de baja densidad de portadores, (es decir campos eléctricos pequeños), estas velocidades vienen dadas por las siguientes relaciones:



**Figura 2.1:** Modelos de generación-recombinación. (A) Recombinación de Auger: a) Recombinación de un electrón, b) Recombinación de un hueco. (B) Captura Banda-Trampa: a) Recombinación de un electrón, b) Recombinación de un hueco.

a)  $C_n n^2 p$

b)  $C_p n p^2$

c)  $\tilde{C}_n n$

d)  $\tilde{C}_p p$

donde las correspondientes  $C_x$  y  $\tilde{C}_x$  son las constantes de velocidad de cada proceso. Suponiendo que se ha alcanzado las condiciones del equilibrio térmico, se tiene [MRS90]:

$$\tilde{C}_n = n_i^2 C_n \quad \tilde{C}_p = n_i^2 C_p \quad (2.11)$$

$$n_i = \left( \frac{2\pi k_b T \sqrt{m_n m_p}}{\hbar} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{-E_g}{2k_b T} \right) \quad (2.12)$$

siendo  $E_g = E_c - E_v$  la denominada *banda prohibida*, (diferencia de energía entre el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia, ver Figura 2.4), y  $m_n$  y  $m_p$  las masas efectivas de electrones y huecos respectivamente. La velocidad total del proceso de generación-recombinación de Auger puede escribirse entonces de la siguiente forma:

$$R_{AU} = (C_n n + C_p p)(np - n_i^2) \quad (2.13)$$

### 2.3.2 Generación y Recombinación banda-trampa

Este tipo de proceso de generación-recombinación es importante en presencia de impurezas en la composición del semiconductor (*dopaje*), las cuales generan niveles de energía adicionales (llamados normalmente *trampas*) en el interior de la banda prohibida. Los procesos involucrados se muestran en la Figura 2.1-(B) y son los siguientes:

- a) *Recombinación de un electrón*: Un electrón se mueve desde la banda de conducción a una trampa vacía.
- b) *Recombinación de un hueco*: Un electrón se mueve desde una trampa ocupada hasta la banda de valencia, desapareciendo un hueco.

De nuevo, también son posibles los procesos opuestos de generación. Las velocidades de todos estos procesos están dadas por:

$$\text{a) } C_a n (N_A - n_t) \quad \text{b) } C_b p n_t \quad \text{c) } C_c n_t \quad \text{d) } C_d (N_A - n_t)$$

donde  $N_A$  es la densidad de trampas aceptoras y  $n_t$  la densidad de trampas ocupadas. Las densidades  $n$ ,  $p$  y  $n_t$  satisfacen las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\partial_t n + \nabla \cdot j_n = C_c n_t - C_a n (N_A - n_t) \quad (2.14)$$

$$\partial_t p + \nabla \cdot j_p = C_d n (N_A - n_t) - C_b p n_t \quad (2.15)$$

$$\partial_t n_t = C_a n (N_A - n_t) - C_c n_t + C_b p n_t - C_d (N_A - n_t) \quad (2.16)$$

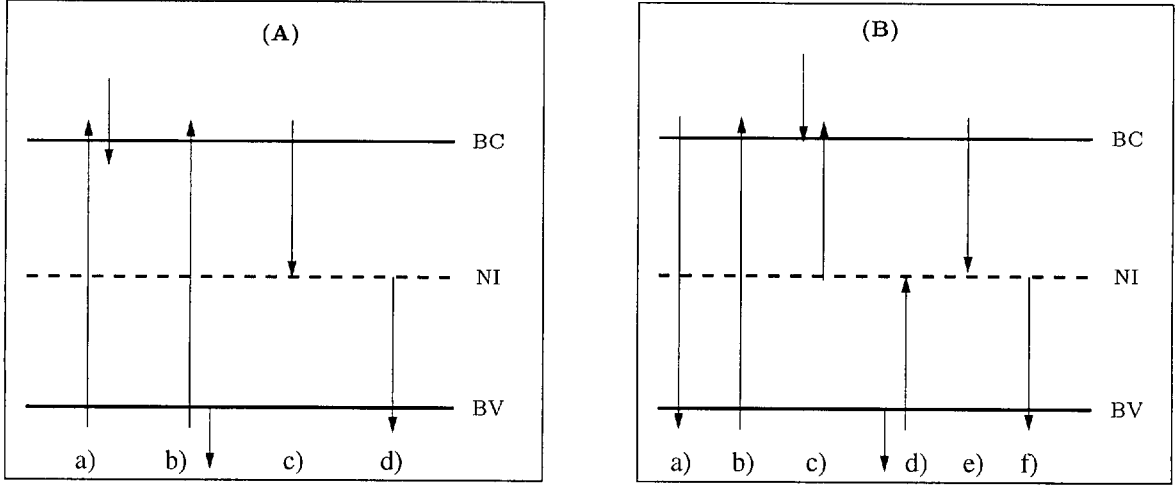
donde  $j_n$  y  $j_p$  son las densidades de flujo de electrones y huecos, respectivamente. En la teoría clásica de las transiciones banda-trampa, debida a Shockley, Read [SR52] y Hall [Hal52], se supone que la relajación de  $n_t$  hacia el equilibrio es mucho más rápida que la relajación de  $n$  y  $p$ . Esto hace que  $\partial_t n_t = 0$  y la velocidad de generación-recombinación global en el modelo Shockley-Read-Hall (SRH) queda:

$$R_{SRH} = \frac{n p - n_1 p_1}{\tau_p (n + n_1) + \tau_n (p + p_1)} \quad (2.17)$$

donde se incluyen las densidades  $n_1 = C_c/C_a$  y  $p_1 = C_d/C_b$ , y los tiempos de vida de los portadores  $\tau_n = (C_d N_A)^{-1}$  y  $\tau_p = (C_b N_A)^{-1}$ .

### 2.3.3 Ionización por Impacto

La *ionización por impacto* es otro mecanismo de generación-recombinación que se produce cuando existen niveles de energía adicionales de impurezas (donantes o aceptores). Si debido a un determinado campo eléctrico, un portador de carga libre (electrón o hueco) gana la suficiente energía cinética, éste puede transferirla mediante una colisión a un portador de carga “ligado”, el cual es liberado a la banda de conducción (en el caso de ser un electrón) o a la banda de valencia (en el caso de ser un hueco). Esto generará un nuevo portador libre, el cual puede a su vez, ionizar por impacto a otros portadores ligados. Tal proceso de *autocatálisis* produce un aumento rápido de la densidad de portadores libres. El coeficiente de ionización, por encima de un campo eléctrico umbral, (necesario para activar a los portadores con una energía suficiente para la ionización), aumenta fuertemente con el campo eléctrico. Básicamente existen dos tipos de ionización por impacto: banda-banda y banda-trampa.



**Figura 2.2:** Modelos de ionización por impacto. (A) Tipo banda-banda: a) recombinación banda-banda, b) generación, c) ionización por impacto, d) relajación lineal, e) recombinación Auger. (B) Tipo Banda-Trampa: a) recombinación, b) generación banda-banda, c) y d) ionización por impacto banda-trampa, e) captura de un electrón, f) captura de un hueco. Las siglas de la izquierda de las figuras (A) y (B) corresponden a: BC (banda de conducción), NI (nivel de impurezas) y BV (banda de valencia).

### 2.3.3.1 Ionización por impacto tipo banda-banda

El mecanismo más simple basado en la ionización por impacto tipo banda-banda [LP76] se muestra de forma esquemática en la Figura 2.2-(A), donde se presenta un semiconductor extrínseco con los siguientes procesos: a) recombinación banda-banda, b) generación, c) ionización por impacto, d) relajación lineal (atrapamiento que no afecta a la relación  $n \approx p$ ). Denominemos  $N_D$  a la densidad de donantes, que están parcialmente compensados por  $N_A < N_D$  aceptores,  $N_D^* = N_D - N_A$  a la densidad efectiva de donantes,  $N_t > N_D^*$  a la densidad de trampas y  $n_t = N_D^* - n$  a la densidad de electrones atrapados. Entonces las ecuaciones de tasa para las densidades de electrones libres  $n$  y huecos  $p$  son las siguientes [Sch87]:

$$\dot{n} = C_a n + C_b p - C_c (N_t - n_t) n \quad (2.18)$$

$$\dot{p} = C_a n + C_b p - C_d p n_t \quad (2.19)$$

supuesto que ignoremos el movimiento de cargas. Se complementan estas ecuaciones con la condición de neutralidad de carga:

$$N_D^* - n - n_t + p = 0 \quad (2.20)$$

### 2.3.3.2 Ionización por impacto tipo banda-trampa

Un mecanismo simple de generación-recombinación basado en la ionización por impacto tipo banda-trampa [SL79] se muestra en la Figura 2.2-(B), en el que se ha considerado un semiconductor extrínseco con unas impurezas donantes totalmente ionizadas. Ignorando como

antes el movimiento de las cargas, las ecuaciones de tasa de electrones y huecos para este mecanismo se pueden escribir en la forma:

$$\dot{n} = [C_c n_t - (C_a - C_c) p] n \quad (2.21)$$

$$\dot{p} = [C_d P_D - (C_a - C_d) n] p \quad (2.22)$$

donde se ha utilizado la condición de neutralidad de carga (2.20) para eliminar  $n_t$  y se ha introducido la variable:

$$P_D = N_t - N_D^* \quad (2.23)$$

## 2.4 Mecanismos de Producción de NDC

En esta sección describiremos dos fenómenos físicos responsables de la formación de una curva característica corriente-campo eléctrico en forma de  $\mathcal{N}$ , responsable de la conductividad diferencial negativa (NDC), (ver Sección 1.3.1).

En un estado espacialmente homogéneo y sin considerar efectos de difusión, podemos expresar la densidad de carga electrónica  $j$  en función del campo eléctrico aplicado,  $\mathcal{E}$ , de la siguiente forma, (ver Capítulo 3):

$$j(\mathcal{E}) = e \mathcal{V}(\mathcal{E}) n(\mathcal{E}) \quad (2.24)$$

donde  $e$  es *menos* la carga del electrón,  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  es la velocidad media de convección de las cargas y  $n(\mathcal{E})$  es la densidad electrónica dependiente del campo. Como se ha comentado en el capítulo anterior, para pequeños campos eléctricos aplicados la velocidad es aproximadamente proporcional a  $\mathcal{E}$  y la densidad de carga es independiente del campo. En estos casos se observa un comportamiento óhmico del sistema, con una característica  $I$ - $V$  (corriente-voltaje) lineal. Sin embargo, a medida que el campo eléctrico aumenta, tanto la dependencia de  $\mathcal{V}$  como de  $n$  se hace no lineal, dejando de ser válida la ley de Ohm. La conductividad diferencial,  $\sigma$ , viene definida mediante la siguiente expresión:

$$\sigma \equiv \frac{dj}{d\mathcal{E}} = e \left\{ n \frac{d\mathcal{V}}{d\mathcal{E}} + \mathcal{V} \frac{dn}{d\mathcal{E}} \right\} \quad (2.25)$$

Para que puedan producirse efectos de NDC es necesario que  $d\mathcal{V}/d\mathcal{E} < 0$  y/o  $dn/d\mathcal{E} < 0$ . Esto significaría una disminución de la velocidad y/o la densidad electrónica al aumentar el campo eléctrico, encontrándose ambas posibilidades en los semiconductores reales. El primer caso, ( $d\mathcal{V}/d\mathcal{E} < 0$ ), se conoce con el nombre de *movilidad diferencial negativa*, NDM, (del inglés *Negative Differential Mobility*) y ocurre en semiconductores que presentan el mecanismo físico conocido como *transferencia intervalle de electrones calientes*. Como se verá en la próxima sección, este mecanismo se produce en semiconductores que poseen distintos valles no equivalentes en la banda de conducción. Para campos eléctricos altos, los electrones situados en el valle de menor energía pueden ser transferidos a los valles de mayor energía, sin que cambie la concentración total de electrones. Este fenómeno produce una velocidad electrónica en forma de  $\mathcal{N}$  como función del campo eléctrico, repitiéndose la misma forma en la densidad de corriente local como función del campo eléctrico.

El segundo caso, ( $dn/d\mathcal{E} < 0$ ), se da en semiconductores que muestran el fenómeno conocido como *atrapamiento de impurezas* y se produce en semiconductores cuyos electrones pueden ser atrapados en niveles de impurezas (como se vio en la Sección 2.3.2). Si el correspondiente coeficiente de captura aumenta con el campo eléctrico, la diferencia entre los electrones libres y atrapados pueden generar una curva de la densidad de corriente en función del campo eléctrico en forma de  $\mathcal{N}$ .

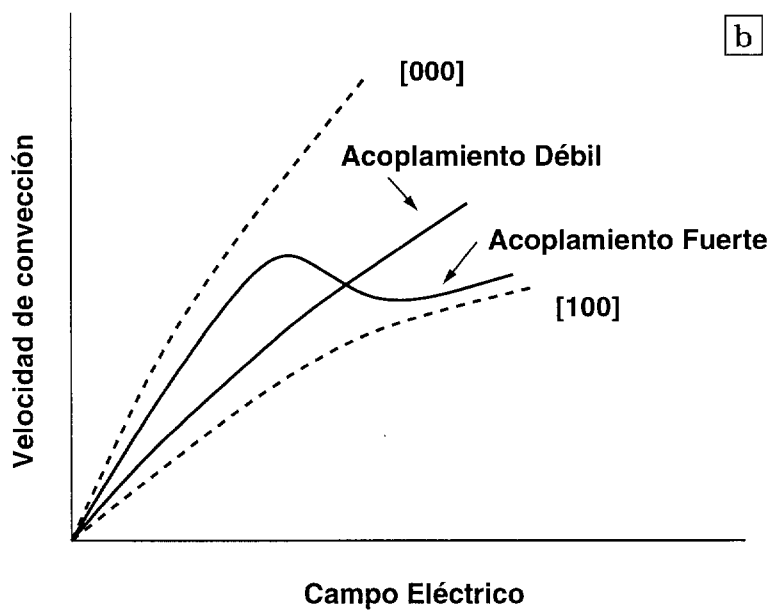
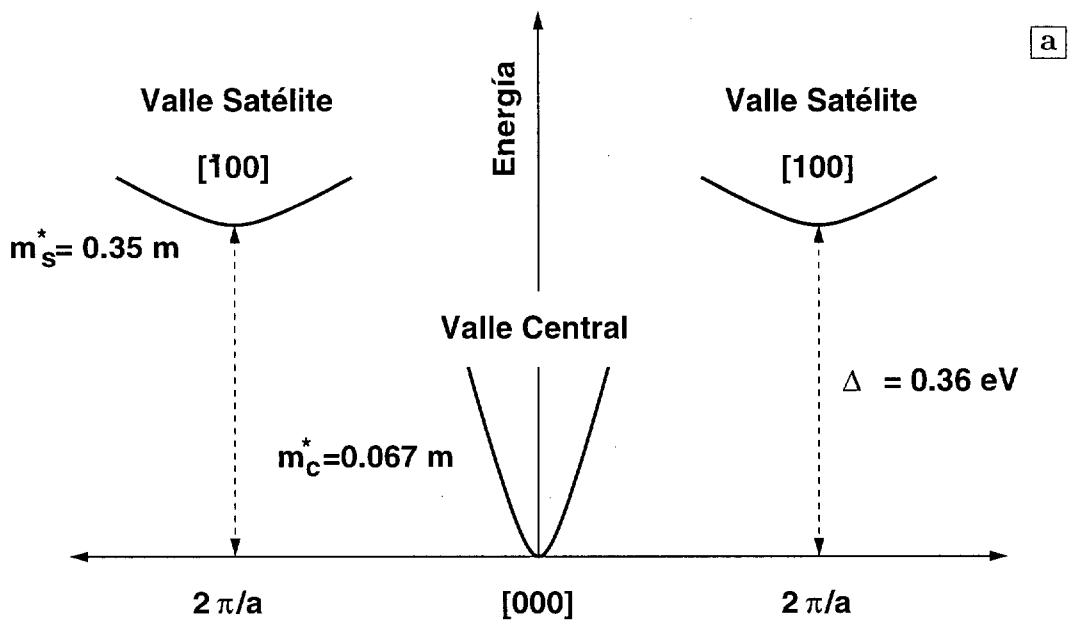
Existen otros posibles mecanismos físicos que producen curvas características en forma de  $\mathcal{N}$  [SMSG92], pero el análisis del efecto Gunn es muy similar en todos ellos, por lo que en esta tesis sólo nos centraremos en los dos mecanismos descritos anteriormente. En las dos siguientes secciones se describirán más detalladamente los mecanismos de transferencia intervalle y de atrapamiento de impurezas.

### 2.4.1 Transferencia Intervalle

El mecanismo de la transferencia intervalle fue propuesto por B.K. Ridley, T.B. Watkins [RW61] y C. Hilsum [Hil62] a principios de los años 60, antes de que fuera descubierto el efecto Gunn de forma experimental por J.B. Gunn.

En la Figura 2.3-(a) se muestra de forma esquemática el diagrama de  $\epsilon(\vec{k})$  para la banda de conducción del GaAs sobre los 0.4 eV y para los vectores  $\vec{k}$  en las direcciones cristalográficas [100] y  $[\bar{1}00]$  [Ehr60, But67]. Al igual que en el caso de los electrones libres, el mínimo de la energía se produce en la base del *valle central* de esta estructura de bandas, para  $k = 0$  (denominado punto  $\Lambda$  en la zona de Brillouin). Pero a diferencia de los electrones en el vacío, aparecen mínimos de energía adicionales para valores de energía superiores, (llamados *valles satélites*), a lo largo de las direcciones del espacio  $\vec{k}$  [100] y [111] (esta última no mostrada en la figura). Los valles satélite [100] están localizados en  $k = 2\pi/a$  y los valles [111] en  $k = \pi\sqrt{3}/a$ , donde  $a$  es la constante de la red de GaAs. Sin embargo, de acuerdo a la ecuación (2.5), la velocidad de un electrón no depende del valor de  $k$ , sino únicamente de la pendiente de la relación  $\epsilon(\vec{k})$ , es decir, de la localización relativa de  $\vec{k}$  con respecto al centro del valle. La localización exacta de los valles, tiene poca influencia sobre el efecto Gunn. Lo que si es importante es la energía del conjunto de los valles inferiores, variando enormemente de un semiconductor a otro. En el GaAs los valles [100] son considerados el conjunto de valles de menor energía [Ehr60] y están localizados sobre 0.36 eV por encima del valle central. Este es un valor muy favorable en el sentido de ser muy grande comparado con la energía térmica  $kT$  ( $\cong 0.026$  eV a temperatura ambiente), pero suficientemente pequeña comparada con la energía de separación entre las bandas de valencia y conducción ( $\cong 1.35$  eV).

Esta estructura de bandas difiere drásticamente de la mostrada por los semiconductores comunes, silicio y germanio. En ambos, el mínimo de energía no ocurre en  $k = 0$ , sino que se produce en los valles satélite [100] en el caso del silicio y en el [111] en el caso del germanio. Ya que el máximo de la banda de valencia se produce en  $k = 0$  para casi todos los semiconductores de interés práctico, el germanio y el silicio se denominan “semiconductores de intervalo indirecto” (*indirect-gap*) y el GaAs y otros compuestos con estructuras de bandas similares, “semiconductores de intervalo directo” (*direct-gap*). Esta distinción es importante desde el punto de vista práctico, ya que por ejemplo el germanio y el silicio son mucho mejores materiales que el GaAs para ser utilizados como transistores bipolares, pero son inefectivos para láseres de inyección, para lo cual el GaAs es excelente. Como se verá, la estructura de bandas en el caso directo es un ingrediente esencial para el efecto Gunn.



**Figura 2.3:** (a) Esquema de la estructura de bandas del GaAs [Ehr60, But67], mostrándose los valores de las masas efectivas y la separación intervalle  $\Delta$ . (b) Curvas de las velocidades de convección medias en función del campo eléctrico para la conducción en los valles central [000] y satélite [100], en los casos de acoplamiento débil y fuerte [SGS79].



Para valores suficientemente pequeños del número de onda  $k$ , uno puede desarrollar  $\epsilon(\vec{k})$  en series de Taylor en un entorno de  $k = 0$ , hasta orden cuadrático, (la forma aproximada de los valles será entonces parabólica):

$$\epsilon(\vec{k}) = \alpha_{xx}k_x^2 + \alpha_{yy}k_y^2 + \alpha_{zz}k_z^2 + \beta_{xy}k_xk_y + \beta_{xz}k_xk_z + \beta_{yz}k_yk_z \quad (2.26)$$

Ya que el GaAs tiene una red cristalina cúbica, los tres valores de  $\alpha$  deben ser iguales y los tres  $\beta$  deben ser cero. Utilizando la ecuación (2.10), esto puede ser reescrito de la siguiente forma:

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*} \quad (2.27)$$

donde la masa efectiva del valle central  $m_c^*$  se ha reducido de nuevo a un escalar, como en el caso del electrón libre.

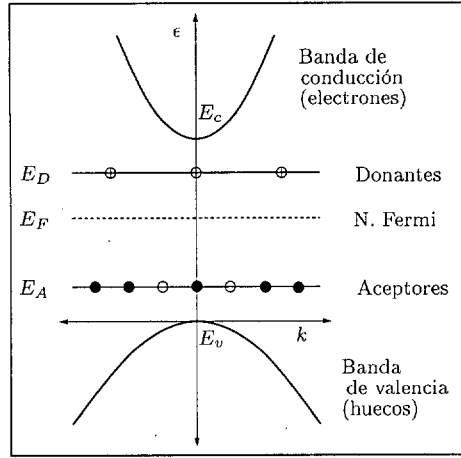
Es típico que para muchos semiconductores directos, la masa efectiva del valle central sea considerablemente menor que la masa del electrón libre. En el GaAs por ejemplo,  $m_c^* \cong 0.07 m_0$ . Estos electrones poseen por tanto una mayor aceleración que los electrones en el vacío, a pesar de la existencia de una fuerte dispersión electrónica (*scattering*) dentro del semiconductor. En el GaAs a temperatura ambiente, la movilidad de campo bajo  $\mu_0$  está sobre los 8000 cm<sup>2</sup>/Vs, aproximadamente el doble del valor del germanio, cuatro veces la del silicio y mucho más alta que la típica de los metales. Esta movilidad tan alta es esencial para el efecto Gunn.

La masa efectiva en los valles satélites es mucho mayor que la correspondiente al valle central. Esto se ha indicado en la Figura 2.3-(a) mostrando una dependencia mucho más débil de  $\epsilon$  sobre  $\vec{k}$  cerca de la base de los valles. No se conocen los valores exactos para estas masas efectivas y mucho menos sobre la anisotropía de cada valle individual<sup>1</sup>. El conjunto combinado de los valles satélites<sup>2</sup> se comportan de forma similar a un único valle isotrópico con una masa efectiva escalar  $m_s^* = m_0$ .

En resumen, bajo condiciones de equilibrio y si la temperatura del cristal  $T$  es mucho menor que  $\Delta/k_b$ , la gran mayoría de los electrones poblarán el mínimo del valle central. Allí poseen una masa pequeña y una alta movilidad,  $\mu_c$ . Sin embargo, cuando se aplica un campo eléctrico,  $\vec{\mathcal{E}}$ , los electrones se *calientan* hasta una temperatura electrónica,  $T_e$ , ( $T_e > T$ ), y se transfieren al mínimo de los valles satélites, donde su masa es mayor y su movilidad,  $\mu_s$ , menor. Para campos suficientemente altos, un gran número de electrones pueden ser inducidos hacia este mínimo superior, disminuyendo la movilidad media de la muestra. Este proceso generará una reducción en la movilidad de la muestra, ya que ésta es inversamente proporcional a la curvatura de las bandas de energía, (ver Figura 2.3-(a)). De hecho, si el acoplamiento intervalle es lo suficientemente fuerte, se producirá el fenómeno de NDC, como se muestra de forma esquemática en la Figura 2.3-(b).

<sup>1</sup>Ya que los valles satélites no están localizados en  $k = 0$ , éstos no tienen por qué ser isotrópicos, ni siquiera en semiconductores cúbicos.

<sup>2</sup>Hay un valle [100] por cada una de las direcciones [100] y equivalentemente para los valles [111].



**Figura 2.4:** Esquema del diagrama de bandas de energía en equilibrio térmico.  $E_F$  es el nivel de Fermi,  $E_D$  es el nivel de energía de las impurezas superficiales (donantes) y  $E_A$  el nivel de energía de impurezas profundas (aceptores o centros de recombinación).  $E_c$  es el mínimo de la banda de conducción,  $E_v$  es el máximo de la banda de valencia y  $E_G = E_c - E_v$  es la banda prohibida.

### 2.4.2 Captura por Impurezas

En esta sección consideraremos otro mecanismo de producción de características corriente-voltaje de tipo  $\mathcal{N}$ : la captura electrónica por impurezas con niveles de energía profundos (impurezas profundas), el cual fue desarrollado en la Sección 2.3.2.

Consideraremos el sistema simple idealizado mostrado en la Figura 2.4. Normalmente la mayoría de los electrones son proporcionados por donantes superficiales con concentración  $N_D$ . Si asumimos que en ausencia de impurezas todos los donantes están ionizados, entonces todos los electrones estarán en la banda de conducción. Si existen impurezasceptoras profundas, (también llamadas *centros de recombinación*), con concentración  $N_A$ , éstas capturarán a los electrones y quedarán cargadas negativamente. Esto es así, debido a que los centros de recombinación se encuentran suficientemente por debajo del nivel de Fermi, (nivel de energía que a una temperatura dada tiene una probabilidad 1/2 de estar ocupado), ver Figura 2.4. De esta forma, en el equilibrio térmico  $\partial_t n_t = 0$  y todos los aceptores estarán completamente rellenos con electrones ( $p = 0$ ).

De la ecuación (2.16) tendremos entonces:

$$n(\mathcal{E}) = \frac{C_c n_t}{C_a(\mathcal{E})(N_A - n_t)} \quad (2.28)$$

Es importante destacar que el coeficiente de captura  $C_a$ , (ver Sección 2.3.2), depende de la función de distribución de electrones en la banda de conducción y es por tanto una función del campo eléctrico,  $\mathcal{E}$ , mientras que  $C_c$  depende únicamente de la temperatura del cristal.

En el caso de que  $dC_a/d\mathcal{E} > 0$  (el coeficiente de captura aumenta con el campo), entonces  $dn/d\mathcal{E} < 0$  y por tanto la densidad de corriente electrónica  $j \approx qn\mathcal{V}$ , decrecería al aumentar el campo, produciéndose NDC. El coeficiente de captura,  $C_a(\mathcal{E})$ , puede aumentar con el campo si los electrones superan una barrera de potencial de Coulomb, necesaria para poder ser atrapados por las impurezas.

Algunos ejemplos de materiales que muestran este mecanismo son el germanio dopado con átomos de oro y el GaAs semi-aislante. En muestras de estos materiales, los tiempos característicos de los mecanismos de atrapamiento dominan las oscilaciones de la corriente a voltaje constante. En estos casos, las frecuencias típicas de las oscilaciones, (de unos pocos Hz a el rango de los MHz), son mucho menores que las observadas en materiales con transferencia intervale, (frecuencias de microondas en el rango de los GHz). Las bajas frecuencias arruinan el posible uso de estos materiales como dispositivos oscilatorios rápidos. Sin embargo, en este tipo de semiconductores pueden observarse experimentalmente la formación de patrones y estructuras espacio-temporales sobre los 100 Hz, a un coste mucho menor que en otros semiconductores [BK01].

## 2.5 Factores Importantes en la NDC

La manifestación de la inestabilidad de la corriente observada en un semiconductor NDC depende de forma crítica de tres factores:

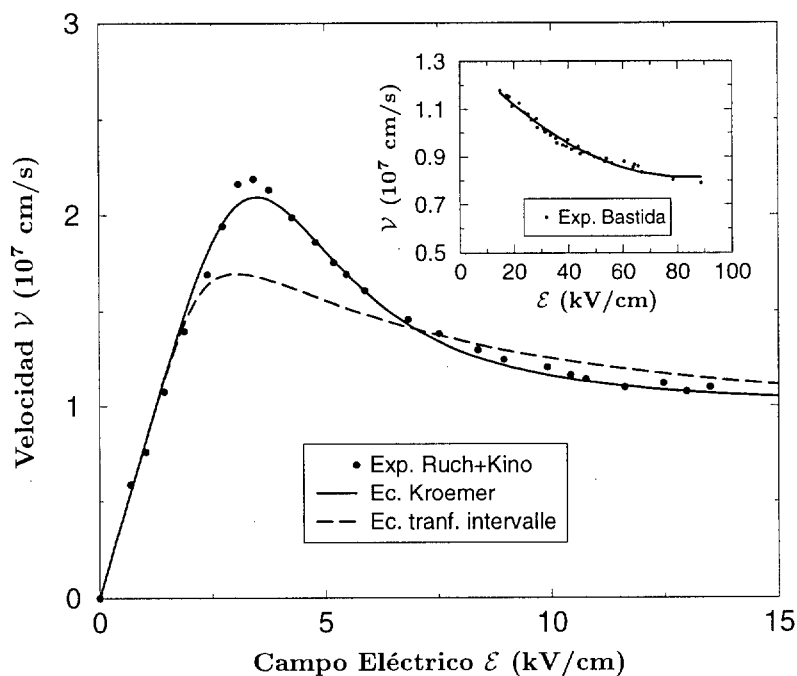
1. Las características eléctricas del semiconductor. Dichas propiedades han recibido una considerable atención durante los últimos 40 años [Var66, Var69]. De todas ellas, la más importante es la característica velocidad-campo eléctrico.
2. El tipo de circuito en el cual opera.
3. Las condiciones en los extremos de la región activa, en particular las condiciones en el contacto inyector de portadores (el cátodo en semiconductores tipo n).

En las siguientes secciones desarrollaremos de forma detallada cada uno de estos factores.

### 2.5.1 La Característica $\mathcal{V}(\mathcal{E})$

La determinación de la velocidad de convección de los electrones en función del campo eléctrico es decisiva para saber si en un determinado material se pueden producir el efecto Gunn. Hilsum [Hil62] fue el primero en calcular la curva  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  para el n-GaAs. Con un modelo más bien simple predijo un pico de la velocidad a un campo de 3 kV/cm, valor muy cercano al real (alrededor de 3.2 kV/cm). Un proceso similar e intuitivo fue realizado posteriormente por McCumber y Chynoweth [MC66]. Unos cálculos más detallados los desarrollaron Butcher y Fawcett [But67, BF66], asumiendo desplazamientos con una distribución Maxwelliana y temperatura electrónica distinta en cada valle.

La determinación experimental de la velocidad electrónica es una tarea complicada, ya que al conectar un determinado material con corriente continua en su región NDM, se produce una reorganización de los campos, de forma que queda enmascarado el efecto. Por tanto, para medir directamente la curva  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  es necesario realizar los experimentos en un tiempo suficientemente corto para que los campos permanezcan suficientemente uniformes. Esto es posible realizarlo mediante experimentos denominados “en tiempo de vuelo” (*time-of-flight*), donde las cargas son inyectadas en el material, en el que previamente se le ha reducido el tiempo de relajación diferencial dieléctrica a un valor suficientemente pequeño, de forma que se inhibe la inestabilidad. Esta técnica fue utilizada por Ruch y Kino [RK67] para obtener los valores más precisos que se conocen hasta la fecha de la velocidad en el n-GaAs.



**Figura 2.5:** Curva de velocidad de convección en función del campo eléctrico para el GaAs. Se muestra los resultados experimentales de Ruch y Kino [RK67] (puntos), junto con las aproximaciones teóricas de Kroemer [Kro66] (línea continua) y la obtenida por la teoría de la transferencia intervalle (línea discontinua). En el gráfico pequeño de la parte superior se muestra la curva experimental obtenida por Bastida *et al.* [BFSV71], para valores de campo altos.

En la Figura 2.5 se muestran dichos resultados. Desafortunadamente, los datos de Ruch y Kino sólo se conocen hasta aproximadamente 14 kV/cm, estando aún la velocidad descendiendo en este punto. No está nada claro cual es el comportamiento de la velocidad para campos más altos, existiendo diferentes experimentos que apuntan a una gradual disminución de la velocidad para campos altos (con valores que oscilan entre  $8$  y  $10 \times 10^6$  cm/s a 60 kV/cm y sobre  $6 \times 10^6$  cm/s a 300 kV/cm), y por otra parte algunos estudios teóricos predicen un suave mínimo de la velocidad en el rango de 15 a 60 kV/cm [LKE<sup>+</sup>72]. Existe un método indirecto desarrollado por Bastida *et al.* [BFSV71] que permite obtener medidas de la velocidad para valores altos del campo, (ver gráfico superior pequeño en Figura 2.5). También se han realizado medidas de la velocidad sobre otros materiales semiconductores como n-InP [Glo72] y n-Ge [CR68].

Una forma simple y muy utilizada en los cálculos numéricos para aproximar la velocidad a cualquier valor del campo eléctrico, es utilizar una modificación de la ley propuesta por Kroemer [Kro66]:

$$\nu(\epsilon) = \frac{\mu_0 \epsilon + \nu_\infty (\epsilon/\epsilon_c)^K}{1 + (\epsilon/\epsilon_c)^K} \quad (2.29)$$

donde  $\mu_0$  es la movilidad de campo bajo ( $\approx 8000$  cm<sup>2</sup>/Vs para el caso de GaAs),  $\nu_\infty$  es la velocidad asintótica a campos altos,  $\epsilon_c$  es algún valor de campo característico y  $K$  es algún “exponente de excitación”.

En esta fórmula se supone que la relación entre los electrones del valle central ( $n_c$ ) y los electrones de los valles satélites ( $n_s$ ), obedece una simple ley de potencias de la forma:

$$\frac{n_c}{n_s} = \left( \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_c} \right)^K \quad (2.30)$$

lo cual es puramente fenomenológico y sin ninguna base física, sin embargo, como puede observarse en la Figura 2.5, eligiendo unos valores apropiados de  $\mu_o$ ,  $\mathcal{V}_\infty$ ,  $\mathcal{E}_c$  y  $K$ , se pueden obtener excelentes ajustes a los valores experimentales.

La fórmula de Kroemer sólo es válida para ajustes de datos experimentales y no para predecir variaciones de comportamiento de la velocidad con la temperatura, ya que sus coeficientes carecen de base física.

En algunos casos, una forma alternativa e interesante de estimar la velocidad de convección en función del campo, es utilizar las bases del mecanismo de la transferencia intervalle estudiado en la Sección 2.4.1. Suponiendo: (1) que el cambio del momento y la energía dentro de cada valle son más rápidos que los procesos de dispersión electrónica (*scattering*) de fonones o impurezas, y (2) que el tiempo característico entre las transiciones intervalle son mucho mayores que los tiempos del momento electrónico y la energía de relajación dentro de cada valle; entonces en estos casos, la temperatura electrónica es la misma para todos los valles, pero no su población. Como el tiempo de transición intervalle es  $\tau_i \approx 10^{-11} s$  o menor para compuestos III-V, la descripción que damos a continuación es válida para materiales que muestran oscilaciones tipo Gunn de frecuencias superiores a 100 GHz (cuyos periodos correspondientes son menores que  $\tau_i$ ).

Sean  $n_c$  y  $n_s$  las concentraciones electrónicas en los valles central (inferior) y satélite (superior), respectivamente. Si la concentración total  $n = n_c + n_s$  es constante, la densidad de corriente en el estado estacionario será,

$$j = e(\mu_c n_c + \mu_s n_s) \mathcal{E} \equiv e n \mathcal{V}(\mathcal{E}) \quad (2.31)$$

En esta ecuación se ha introducido el valor absoluto de la velocidad media de arrastre,

$$\mathcal{V}(\mathcal{E}) = \frac{\mu_c n_c + \mu_s n_s}{n_c + n_s} \mathcal{E} \approx \frac{\mu_c}{1 + n_s/n_c} \mathcal{E} \quad (2.32)$$

donde se ha supuesto que  $\mu_c \gg \mu_s$ , que normalmente ocurre para los compuestos III-V. Observar que la característica  $\mathcal{V} - \mathcal{E}$  es equivalente a la característica corriente-voltaje a  $n$  constante. La proporción entre las poblaciones del valle inferior y superior, está determinada por la energía de separación y la temperatura electrónica de la siguiente forma,

$$\frac{n_s}{n_c} = R e^{-\frac{\Delta}{k_B T_e}} \quad (2.33)$$

Aquí,  $R = \mathcal{N}_s(m_s/m_c)^{\frac{3}{2}}$  es la proporción entre la densidad de estados de los valles central y satélite, ( $\mathcal{N}_s$  es el número de valles superiores). Para GaAs hay cuatro valles superiores (valles  $L$ ),  $n_s = 4$ ,  $m_c = 0.067 m_o$ ,  $m_s = 0.55 m_o$ , de forma que  $R \approx 94$ . Para encontrar  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$ , las ecuaciones (2.31)–(2.33) deben ser complementadas por un cálculo de la temperatura electrónica como función del campo. En general, tal cálculo se debería hacer resolviendo la ecuación de Boltzmann, dependiendo el resultado de los mecanismos particulares de dispersión electrónica.

Semiconductor	$T$ , (K)	$\Delta$ , (eV)	$\mathcal{E}_M$ , (kV/cm)	$\mathcal{V}_M$ , ( $10^7$ cm/s)
GaAs	300	0.36	3.2	2.2
InP	300	0.53	10.5	2.5
InAs*	300	1.25	1.6	3.6
InSb*	77	0.41	0.6	5.0

\* Bajo Presión

**Tabla 2.1:** Parámetros relacionados con el efecto de transferencia electrónica intervalle.

Como estimación, se puede utilizar la siguiente ecuación basada en un simple balance de energía, [BK01]:

$$e\mathcal{E}\mathcal{V} = \frac{3}{2}k_B \frac{T_e - T}{\tau_E} \quad (2.34)$$

asumiendo que el tiempo de relajación,  $\tau_E$ , es independiente del campo. Insertando la ecuación (2.32) en (2.34), se obtiene la siguiente ecuación para la temperatura electrónica como función del campo:

$$T_E = T + \frac{2e\tau_E\mu_c}{3k_B} \frac{\mathcal{E}^2}{1 + R e^{-\frac{\Delta}{k_B T_e}}} \quad (2.35)$$

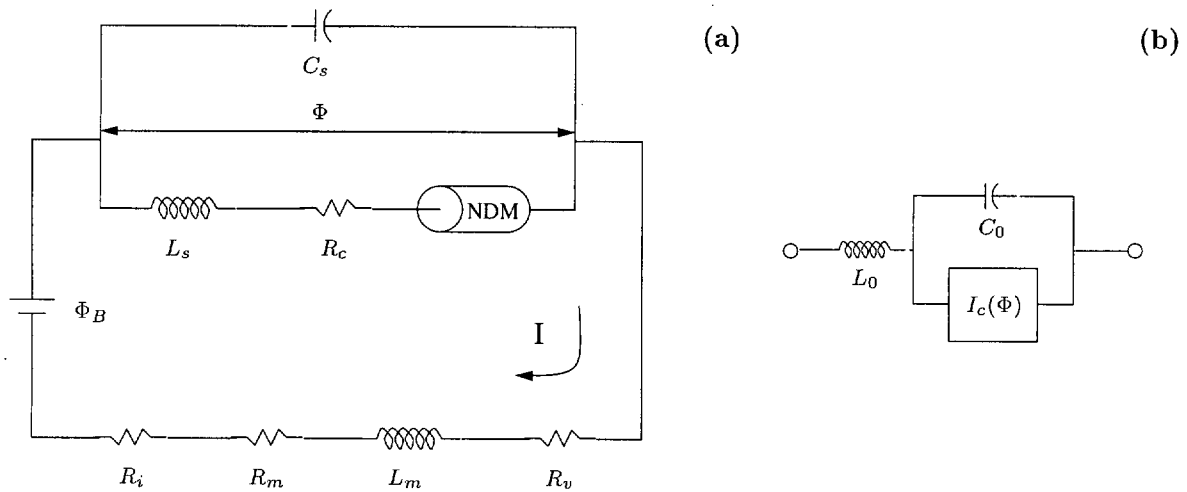
Resolviendo esta ecuación no lineal, se obtiene una aproximación de  $T_e$  y así  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  puede encontrarse sustituyéndolo en la ecuación (2.33) y posteriormente el resultado, en la ecuación (2.32). Dependiendo de los parámetros, la característica  $\mathcal{V} - \mathcal{E}$  puede mostrar una pendiente negativa. Por ejemplo, para *GaAs* a la temperatura ambiente uno puede seleccionar  $\tau_E = 1.2 \times 10^{-12}$  s,  $\mu_c = 8000$  cm<sup>2</sup>/Vs y  $\Delta = 0.36$  eV. Entonces las ecuaciones (2.35) y (2.32) producen la curva de velocidad electrónica mostrada en la Figura 2.5. Los parámetros de importancia en esta curva son el campo umbral,  $\mathcal{E}_M$ , que define el nacimiento de la región con movilidad diferencial negativa  $d\mathcal{V}/d\mathcal{E} < 0$ , la velocidad electrónica máxima  $\mathcal{V}_M$  y la proporción entre la velocidad pico-valle  $\mathcal{V}_M/\mathcal{V}_m$ , ( $\mathcal{V}_m$  es el mínimo de la velocidad en  $\mathcal{E} > \mathcal{E}_M$ ). Para distintos compuestos III-V los parámetros  $\Delta$ ,  $\mathcal{E}_M$  y  $\mathcal{V}_M$  se muestran en la Tabla 2.1 a diferentes temperaturas del cristal.

### 2.5.2 El Circuito Elemental

Un circuito con un elemento NDC mostrará una serie de inestabilidades debidas tanto, a la respuesta resonante de elementos controlados como a elementos reactivos espúreos. Ya que estas oscilaciones son de importancia fundamental en el conocimiento de la respuesta completa de un elemento NDC a una excitación determinada, es necesario identificar los elementos reactivos del circuito.

Un circuito elemental está formado por el semiconductor, los contactos y los componentes adicionales de soporte. Es necesario destacar los siguientes puntos:

- Las uniones metálicas de los contactos al elemento NDC introducen una resistencia  $R_m$  y una inductancia  $L_m$ .



**Figura 2.6:** (a) Esquema de un circuito elemental conteniendo un elemento NDC. (b) Representación del elemento NDC como un resistor no lineal con un capacitor intrínseco en paralelo y un inductor intrínseco en serie.

- Las regiones de los contactos en si mismos producen a menudo una resistencia no lineal  $R_c$  y también impondrán unas condiciones específicas del campo eléctrico en la interfase del material NDC.
- El soporte, montaje y/o sujeción del elemento NDC en cualquier forma introduce una capacitancia  $C_s$  y una inductancia  $L_s$ .
- Una fuente de voltaje externa, (aquí sólo consideraremos fuentes), contendrá una resistencia interna propia  $R_v$ .
- El propio circuito presenta una resistencia  $R_L$

Todas estas contribuciones se muestran de forma esquemática en la Figura 2.6-(a).

Por otra parte, el elemento NDC puede representarse mediante un resistor no lineal, Figura 2.6-(b), con una relación corriente-voltaje  $I_c(\Phi)$  en paralelo con un capacitor intrínseco  $C_0$  y en serie con un inductor intrínseco  $L_0$ .  $C_0$  y  $L_0$  representan los efectos de una corriente y un voltaje a través del elemento NDC. La forma de  $I_c(\Phi)$  depende principalmente de tres cosas:

- la velocidad  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$ .
- la resistencia no lineal de los contactos  $R_c$ , la cual puede alcanzar valores apreciables al aplicar voltajes suficientemente altos y así dominar la relación  $I_c(\Phi)$  (los contactos metal-metal generalmente poseen campos interfaciales pequeños y valores bajos de  $R_c$  [Kro64]).
- del dopaje del semiconductor.

El esquema se puede simplificar reagrupando términos: llamando  $R = R_i + R_m R_v$ ,  $L_i = L_s + L_0$  (despreciando el acoplamiento mutuo) y  $L = L_m$ . Este sistema tiene por tanto cuatro componentes reactivos, de forma que la ecuación diferencial que gobierna la respuesta transitoria del circuito será de cuarto orden. La presencia de la no linealidad de  $I_c(\Phi)$  complica aún más la resolución analítica del problema.

Generalmente para el estudio del efecto Gunn, este problema puede simplificarse, al ser despreciable el término  $L_i$  [SGS79], quedando reducido el circuito a un problema de segundo orden. Si llamamos  $C = C_s + C_0$ , las ecuaciones de este circuito simplificado vienen dadas por las leyes de Kirchhoff:

$$\Phi_B = IR + L \frac{dI}{dt} + \Phi \quad (2.36)$$

$$I = I_c(\Phi) + C \frac{d\Phi}{dt} \quad (2.37)$$

Estas dos ecuaciones se pueden manipular para obtener las dos ecuaciones diferenciales del problema, [SGS79]:

$$\Phi_B = \left(1 + \frac{I_c(\Phi)}{\Phi}\right) \Phi + \frac{Z_0}{R_0} \left(R_0 \frac{dI_c}{d\Phi} + \frac{R_0 C}{L/R}\right) \frac{d\Phi}{dt'} + \frac{d^2 \Phi}{dt'^2} \quad (2.38)$$

$$\frac{dI}{d\Phi} = \frac{\Phi_B - \Phi - RI}{I - I_c(\Phi)} \frac{1}{Z_0^2} \quad (2.39)$$

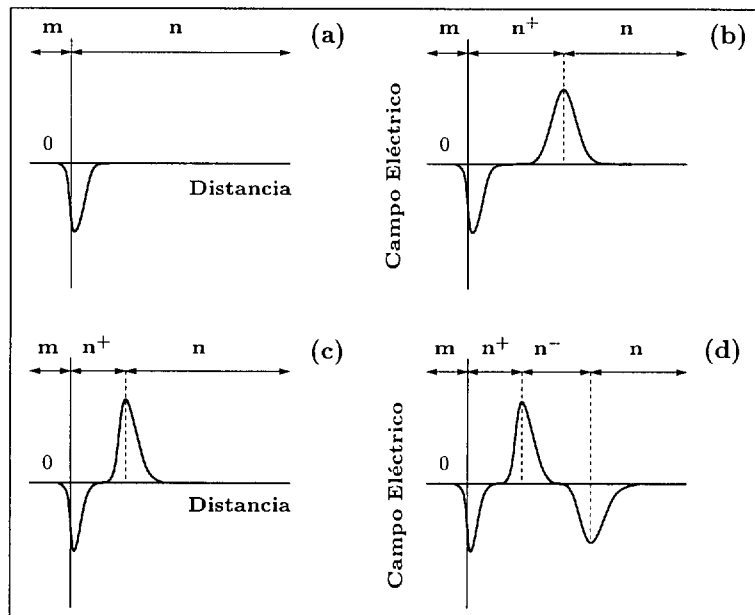
donde  $R_0$  es la resistencia a campo bajo del elemento NDC,  $Z_0 = \sqrt{L/C}$  y  $t' = t/\sqrt{LC}$ .

### 2.5.3 Los Contactos

Las ecuaciones (2.36)–(2.39) contienen la importante relación corriente-voltaje  $I_c(\Phi)$ . Como ya se ha mencionado anteriormente, para una muestra con dopaje relativamente uniforme esta característica está determinada principalmente por la curva  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  y por las condiciones frontera impuestas en los contactos. Asumiendo que  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  puede predecirse y/o ser medida, la cuestión que queda es cómo determinar las condiciones frontera, siendo este uno de los problemas más difíciles de la física del estado sólido; el problema de la interfase metal-semiconductor. En el caso del efecto Gunn, es aun más complicado, ya que la interfase esta formada por una aleación (realizada mediante calentamiento) metal-semiconductor, con lo cual esta zona es más difusa. Claramente, la preparación de esta superficie es un factor esencial en las características fenomenológicas de la interfase, por lo que su preparación requiere extremo cuidado [Gun64]. De estudios realizados sobre las barreras de potencial interfacial para un gran número de semiconductores y aislantes, sólo se han podido obtener reglas empíricas [Mea66].

Ya que el efecto Gunn se produce debido a las propiedades NDM de la curva  $v(\mathcal{E})$  del semiconductor, es necesario alcanzar campos eléctricos muy altos en su interior y por tanto, los contactos deben presentar una baja resistencia. Las aleaciones metal-semiconductor producen un elevado potencial interfacial  $\Omega_B$  y esto puede originar grandes resistencias en la interfase.





**Figura 2.7:** Reordenamiento de las distribuciones de campo eléctrico en el equilibrio para contactos óhmicos, en la zona del cátodo de la región activa [Gru75]. En estas gráficas,  $m$  representa la zona metálica,  $n$  la región activa del semiconductor,  $n^+$  es una zona del semiconductor con alto dopaje. (a) Contacto tipo aleación metal-semiconductor que no produce región  $n^+$ . (b) Contacto con una región  $n^+$  larga que separa la región activa del contacto metal-semiconductor. (c) Contacto con una estrecha región  $n^+$ . (d) Capa  $p^+$  en la interfase  $n - n^+$  que produce campos en la misma dirección que los generados en la interfase metal-semiconductor.

Existen distintas técnicas experimentales para producir contactos de baja resistividad: difusión de una región con alto dopaje,  $n^+$ , en el elemento NDC y posterior evaporización del metal sobre la región  $n^+$ , evaporación del metal directamente sobre el semiconductor y aleación (mediante calefacción y envejecimiento), recristalización líquida, revestimiento y compresión térmica, etc. [MF72]

Los contactos de baja resistividad se denominan *contactos óhmicos* [MF72]. En teoría, un contacto óhmico, sería aquel que posee una relación lineal corriente-voltaje para cualquiera de las dos direcciones de la corriente. En la práctica, sin embargo, el término óhmico significa que la resistividad en los contactos  $R_c$  es pequeña, mucho menor que la resistencia del semiconductor  $R_s$ . Sin embargo, para predecir el comportamiento de un elemento NDC es necesario conocer los campos eléctricos que se producen en los extremos de la región activa del semiconductor, y estos suelen ser considerables incluso para valores  $R_c \ll R_s$ . En la Figura 2.7 se muestran algunas de las reorganizaciones de las distribuciones del campo eléctrico en el equilibrio, que pueden darse en diferentes contactos óhmicos en la zona del cátodo, (estas distribuciones se obtienen resolviendo la ecuación de Poisson incluyendo electrones y huecos). Es interesante destacar que al aplicar un determinado campo en el interior del semiconductor, la distribución espacial  $\mathcal{E}(x)$  aumenta positivamente hacia abajo. Así, las Figuras 2.7-(a) y 2.7-(d) producen capas de reducción de carga en el cátodo hacia la región activa  $n$  y las Figuras 2.7-(b) y 2.7-(c) producen capas de acumulación de carga en el contacto. Como se ha comentado anteriormente, (Sección 1.3.1), nosotros consideraremos un campo eléctrico  $\mathcal{E} = -E$ , de forma que un aumento en el campo eléctrico está representado por un aumento positivo hacia arriba en la distribución  $\mathcal{E}(x)$ .

La cuestión fundamental para la modelización matemática del efecto Gunn es la representación y el tratamiento analítico de los contactos óhmicos. En la práctica, la región activa del elemento NDC será un semiconductor con una concentración de cargas entre  $10^{14} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Normalmente los bordes de la región activa (interfase), poseen un cambio muy brusco en su composición química en una distancia muy pequeña, produciéndose en la misma un aumento brusco del nivel de dopaje, (aproximadamente  $10^{21} \text{ cargas/cm}^3$ ). El tratamiento riguroso de los contactos óhmicos es tremendamente complicado. En general, no se conocen las variaciones espaciales de las aleaciones de los contactos y aunque lo fueran, todavía sería bastante difícil la caracterización de las propiedades eléctricas de las interfaces.

Ya que existen muchas dificultades en el control de la exactitud, la determinación experimental y los cálculos teóricos en la determinación de las condiciones de los contactos, es necesario proponer modelos simples para los mismos. Existen cálculos simplificados considerando a los contactos formados por gradientes en la concentración de cargas [HSJ68, LP71]. Recientemente se han realizado estudios más precisos sobre las condiciones de contorno realistas en el efecto Gunn [GRCB97, BCGR97], dando una ecuación de la forma:

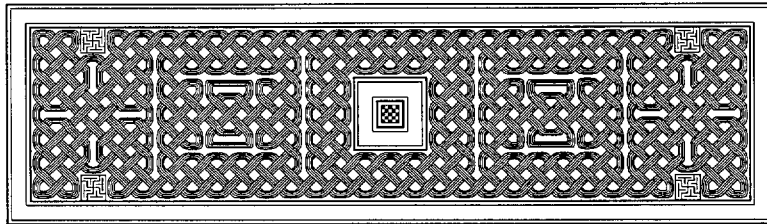
$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x}(i, t) = \frac{e}{\varepsilon} \left( N_c e^{-e\beta\phi_b^i} - n_0 \mp \frac{j_n(i, t)}{\frac{\lambda_i}{N_c}} \right) \quad (2.40)$$

donde el subíndice  $i = 0, L$  representa a cada uno de los contactos,  $e$ ,  $\varepsilon$  y  $n_0$  son la carga del electrón, permitividad del semiconductor y su dopaje respectivamente,  $j_n$  es la densidad electrónica dividida por  $e$ ,  $N_c$  es la densidad de estados efectiva,  $\beta = (kT)^{-1}$ , donde  $k$  es la constante de Boltzmann y  $\lambda_i = A_i T^2 / e$ , donde  $A_i$  es la constante de Richardson del semiconductor en los contactos. Teóricamente,  $A_i$  y por tanto  $\lambda_i$  sólo dependen del tipo de semiconductor y no del metal [Sze81], sin embargo en la práctica se toma como un parámetro fenomenológico que no solo depende del metal sino del procedimiento de preparación de los contactos [Eft93].

En esta tesis se considerarán únicamente contactos óhmicos de muy baja resistividad efectiva, de forma que se aceptará como válido el uso de una aproximación lineal para la característica en los contactos, de la forma:

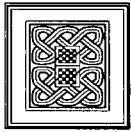
$$j_{con}(\mathcal{E}) = \frac{\mathcal{E}}{\rho_{con}} \quad (2.41)$$

En el Apéndice A se demuestra que las ecuaciones de transporte con condiciones de frontera tipo Dirichlet como (2.41), es un problema bien puesto con soluciones positivas para todo tiempo, [BHH<sup>+</sup>97].



# Semiconductores como Sistemas Dinámicos No Lineales

## 3.1 Introducción



En los últimos años, la modelización matemática del transporte de cargas en los semiconductores se ha convertido en una nueva especialidad dentro del campo de la matemática aplicada. Las ecuaciones del modelo de convección-difusión, las cuales constituyen el modelo más popular para la simulación del comportamiento eléctrico de los dispositivos semiconductores, están hoy en día bastante bien establecidas. Como consecuencia de esto, se han desarrollado métodos numéricos que permiten simulaciones con el ordenador muy relevantes en la mayoría de los casos de interés práctico. Actualmente, las investigaciones sobre el modelo de convección-difusión son de una naturaleza muy especializada, centrándose en la exploración de métodos de discretización más eficientes, en la mejora de los algoritmos de resolución de ecuaciones lineales y no lineales y en aplicaciones tridimensionales.

Este capítulo está organizado de la siguiente forma. En la Sección 3.2, se hace una introducción a los distintos modelos matemáticos existentes, capaces de describir los fenómenos físicos que se desarrollan en los dispositivos semiconductores. En la Sección 3.3, nos centraremos en el modelo de convección-difusión, desarrollando las ecuaciones del denominado modelo de Kroemer. En la Sección 3.4, se considera el modelo unidimensional, estudiando su estabilidad en la Sección 3.5, y analizando las soluciones del mismo en la Sección 3.6.

## 3.2 Ecuaciones de los Semiconductores

Los modelos de transporte que describen el flujo de portadores de cargas en semiconductores, se pueden agrupar de acuerdo a su metodología en clásicos, semi-clásicos y cuánticos. También se pueden clasificar entre modelos de transporte cinéticos e hidrodinámicos [MRS90]. Los modelos de transporte cinéticos gobiernan la evolución de una función densidad de probabilidad en el espacio posición-momento o posición-velocidad. En una descripción cuántica para un sistema de  $M$  partículas, la densidad de probabilidad cuántica (función de Wigner) depende de  $6M + 1$  variables ( $3M$  espaciales,  $3M$  de velocidad y el tiempo). Ya que  $M$  es grande ( $\sim 10^{12}$ ), la determinación de la función de Wigner completa es totalmente inviable hoy en día. En muchos casos, se pueden asumir simplificaciones y la función de Wigner de  $M$  partículas se puede reducir a una función de una única partícula. Igual ocurre

con las aproximaciones semiclásicas en que la función de Wigner se reduce a la densidad de probabilidad y es no negativa. Los dos modelos de este último tipo más utilizados, son los modelos de Vlasov-Poisson y Boltzmann-Poisson, [MRS90].

En la aproximación semiclásica, la evolución de la densidad de probabilidad sigue unas trayectorias clásicas para la posición de las partículas y momento del cristal. El modelo semiclásico se basa en el conocimiento de la estructura de las bandas de energía del sistema. La mayoría de las propiedades del semiconductor se pueden determinar a partir de un número relativamente pequeño de partículas, en el máximo de la banda de valencia, (para el caso de semiconductores tipo p), o en el mínimo de la banda de conducción, (en el caso de semiconductores tipo n). En una aproximación parabólica de las bandas, (ver Sección 2.4.1), la ecuaciones cinéticas de transporte semiclásico se reducen a su contrapartida clásica [MRS90]. Para los dispositivos semiconductores que consideraremos en esta tesis, la aproximación semiclásica con bandas parabólicas es una descripción apropiada.

Por otra parte, en los modelos de transporte de carga fluidodinámicos, la dimensión del número de variables independientes se reduce a cuatro (3 espaciales + tiempo), y las variables dependientes son la densidad electrónica, la densidad de corriente, la temperatura y el campo eléctrico. El modelo de convección-difusión es un tipo de modelo fluidodinámico aun más simplificado, que se obtiene a partir de la ecuación de Boltzmann en el límite de una fuerte dispersión electrónica de corto alcance [MRS90]. Las variables dependientes en este caso son, la densidad electrónica y el campo eléctrico.

### 3.2.1 Modelo de Convección-Difusión

Las ecuaciones del *modelo de convección-difusión* (MCD) fueron desarrolladas por primera vez por Van Roosbroeck [Roo50] y son las más utilizadas hoy día para la simulación numérica de los dispositivos semiconductores. Desde un punto de vista ingenieril, el interés del MCD está en reemplazar todos los experimentos en el laboratorio por simulaciones numéricas para minimizar costes. Para este fin, es importante que los cálculos se puedan realizar en una cantidad de tiempo razonable. Esto implica que los modelos matemáticos involucrados no pueden ser demasiado complejos, como lo son por ejemplo las ecuaciones de transporte multidimensionales. En el estado actual de la tecnología, las ecuaciones del MCD parecen representar un compromiso razonable entre la eficiencia computacional y una descripción precisa de los fundamentos de los dispositivos físicos y por tanto, las ecuaciones de transporte se utilizan principalmente para calcular datos para los parámetros de las ecuaciones del modelo en el entorno ingenieril.

Sin embargo, debe tenerse en cuenta que con el progreso en la miniaturización de los dispositivos semiconductores, (ultra-dispositivos integrados, también llamados *MOS*), se llega más y más cerca de los límites de validez del MCD, incluso en un entorno industrial. La razón de esto es, por una parte, que en los dispositivos más pequeños la suposición de que las cargas libres pueden ser modeladas como un continuo llega a ser invalidada. Por otra parte, las ecuaciones del MCD se derivan a través de un proceso al límite [MRS90], donde el camino libre medio de una partícula tiende a cero. A través de la miniaturización y el uso de materiales distintos del silicio, este camino libre principal llega a ser más y más grande en comparación al tamaño del dispositivo. Además, los efectos cuánticos comienzan a jugar un papel más importante en los nuevos dispositivos. Por esta razón, y debido al rápido aumento de la potencia de los supercomputadores, las extensiones de los MCD (modelos hidrodinámicos) y

los modelos cinéticos, (ecuaciones semiclásica de Boltzmann-Poisson y Wigner-Poisson), se espera que sean utilizadas cada vez más en las simulaciones del futuro. Pero aún entonces, las ecuaciones del MCD seguirán teniendo un papel importante, ya que los efectos microscópicos que no son capaces de describir sólo ocurren localmente. Así, lo más probable será utilizar los modelos más sofisticados sólo localmente, por ejemplo en el canal de un transistor MOS, y utilizar la ecuaciones del MCD en las partes del dispositivo donde describan de forma suficiente la física del problema. En lo que sigue de este capítulo se discutirán las propiedades analíticas de las ecuaciones MCD, estando principalmente interesados en la estructura de sus soluciones.

### 3.3 Modelo de Convección-Difusión de Kroemer

El modelo de convección-difusión más simple, capaz de explicar el efecto Gunn en n-GaAs fue propuesto inicialmente por Kroemer en 1964 [Kro64]. En él, se supone que sólo existe una especie de portador de carga (electrones) y que el efecto NDC es debido al mecanismo de la transferencia intervalle, (Sección 2.4.1). El modelo está formado por la ecuación de continuidad de carga, la ecuación de Poisson, una relación constitutiva para el flujo de electrones, la condición de voltaje constante y las condiciones iniciales y de contorno. Las incógnitas son la concentración de electrones,  $n(\vec{r}, t)$ , y el campo eléctrico,  $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$  (o equivalentemente el potencial eléctrico). Las peculiaridades del material semiconductor son consideradas en la relación constitutiva, que relaciona el flujo de electrones con la densidad electrónica y el campo eléctrico. Las ecuaciones del modelo de convección-difusión se obtienen a partir del modelo de Boltzmann-Poisson, en el límite de una fuerte dispersión electrónica [MRS90, Bon93].

En ausencia de campos magnéticos ( $\text{rot } \mathcal{E} = 0$ ), o cuando su efecto en los portadores es pequeño comparado con el del campo eléctrico, se verifica la ecuación de Poisson:

$$\nabla \cdot \mathcal{E} = \rho \quad (3.1)$$

siendo  $\rho$  la densidad de carga espacial, que viene definida por:

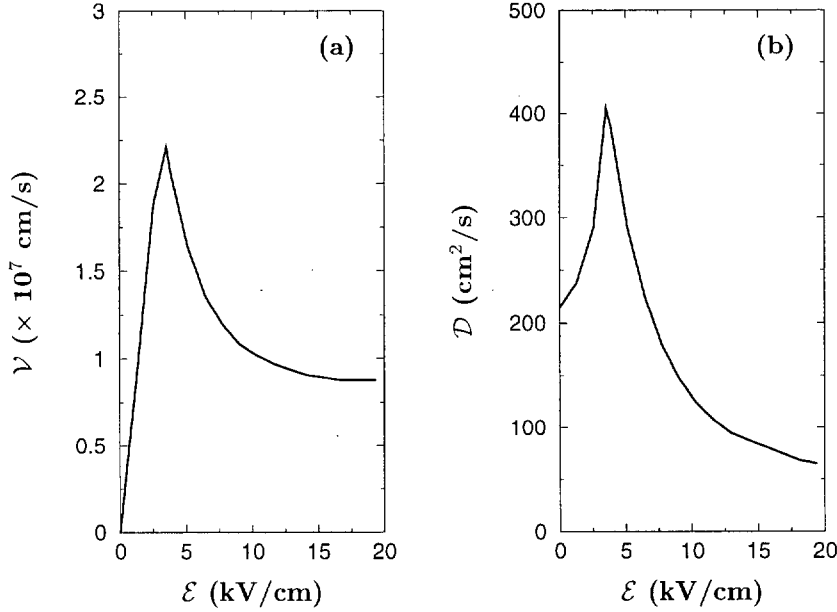
$$\rho = \frac{e}{\varepsilon} (n - n_0) \quad (3.2)$$

donde  $-e$  es la carga del electrón,  $\varepsilon$  es la constante dieléctrica del semiconductor,  $n$  es la densidad de electrones y  $n_0$  es el dopaje (densidad electrónica en el equilibrio). La ecuación de continuidad para la densidad de carga eléctrica es:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathcal{V}(\mathcal{E}) n] - \nabla^2 [\mathcal{D}(\mathcal{E}) n] = 0 \quad (3.3)$$

en la cual se han introducido las funciones, velocidad media de convección electrónica,  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$ , y la difusividad media  $\mathcal{D}(\mathcal{E})$ . Estos coeficientes de transporte se pueden obtener a su vez, mediante un modelo de transferencia de electrones entre valles de la banda de conducción, que no se detallará aquí.

En las Figuras 3.1-(a) y 3.1-(b) se muestran respectivamente las funciones  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  y  $\mathcal{D}(\mathcal{E})$  para el GaAs a temperatura ambiente, calculadas por Butcher y Fawcett [BF66] la primera y por Butcher, Fawcett y Ogg [BFO67] la segunda. La física de estas ecuaciones matemáticas, (mecanismo de transferencia intervalle), está contenida en la dependencia de la velocidad



**Figura 3.1:** Aproximaciones analíticas de las curvas de velocidad y coeficiente de difusión para el GaAs. (a) Característica velocidad de convección-campo eléctrico calculada por Butcher y Fawcett [BF66]. (b) Coeficiente de difusión calculado por Butcher, Fawcett y Ogg [BFO67].

electrónica  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  con el campo eléctrico. Utilizando las ecuaciones (3.1) y (3.2), la ecuación (3.3) se transforma en:

$$\frac{\varepsilon}{e} \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ \mathcal{V}(\mathcal{E}) \left( \frac{\varepsilon}{e} \nabla \cdot \mathcal{E} + n_0 \right) \right] - \nabla^2 \left[ \mathcal{D}(\mathcal{E}) \left( \frac{\varepsilon}{e} \nabla \cdot \mathcal{E} + n_0 \right) \right] = 0 \quad (3.4)$$

Integrando esta ecuación sobre todo el espacio, se obtiene una forma de la ley de Ampère:

$$\varepsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \mathcal{V}(\mathcal{E}) (\varepsilon \nabla \cdot \mathcal{E} + e n_0) - e n_0 \nabla \cdot \mathcal{D}(\mathcal{E}) - \nabla \cdot [\varepsilon \mathcal{D}(\mathcal{E}) \nabla \cdot \mathcal{E}] = j(x, t) \quad (3.5)$$

El campo selenoidal  $j(x, t)$ ,  $\nabla \cdot j = 0$ , se puede interpretar como la densidad de corriente total, suma de la densidad de corriente de desplazamiento,  $\varepsilon \partial \mathcal{E} / \partial t$ , y la densidad de corriente electrónica  $j_e$ , [SGS79, Sze81].

Para obtener un problema matemático bien puesto, es necesario añadir a la ecuación (3.5), una condición inicial para  $t = 0$  y las condiciones de frontera apropiadas [BKH01]. Éstas son, la condición de voltaje constante, (en esta tesis sólo se tratará el problema con corriente continua) y condiciones apropiadas en los contactos. Algunas de las posibles condiciones en los contactos son las siguientes [BK01]:

- Densidad electrónica fija en los contactos:  $n_{0,\ell} = n_{cte}$  (contactos óhmicos). Esta es una condición frontera de tipo Neumann para el campo eléctrico  $\frac{\partial \mathcal{E}_{0,\ell}}{\partial x} = \text{cte}$ .
- Relación fenomenológica para un contacto  $n^+ - n$ : Las componentes normales de las densidades de corriente electrónica y difusiva son proporcionales  $-\vec{N} \cdot \nabla [Dn(\vec{x}, t)] = \zeta_c \vec{N} \cdot \vec{j}$ , ( $\zeta_c$  es un parámetro fenomenológico del contacto, generalmente función del campo eléctrico). Este es un tipo de condición frontera mixta para el campo eléctrico.

- Característica campo eléctrico-contacto: Se supone que existe una relación entre las componentes normales del campo eléctrico y la densidad de corriente electrónica. En el caso más simple esta relación es lineal,  $\vec{N} \cdot \vec{\mathcal{E}} = e r_c \vec{N} \cdot \vec{j}$ , siendo  $r_c$  la resistividad en el contacto. Esta es una condición tipo Dirichlet para el campo eléctrico.
- Contacto metal-semiconductor ideal (*barrera Schottky*):  $-\vec{N} \cdot \vec{j} = \mathcal{V}_c n_{0,\ell} - I_c^m$ , donde  $\mathcal{V}_c$  e  $I_c^m$  son unos parámetros característicos de los contactos [Sho54]

En esta tesis se considerarán únicamente condiciones de frontera del tipo característica lineal campo eléctrico-contacto, ya que es simple desde el punto de vista matemático y al mismo tiempo es representativo para explicar comportamientos reales.

### 3.4 Modelo Unidimensional

Consideremos el problema unidimensional de un trozo de semiconductor, (dimensiones  $a \times b \times \ell$  con  $\ell \gg a, b$ ), con propiedades NNDC, sometido a un determinado voltaje constante. Ya que los resultados no varían cualitativamente, a condición que  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  tenga forma de  $\mathcal{N}$  y  $\mathcal{D}(E) > 0$ , se asumirá un valor para la difusividad conocido e independiente del campo eléctrico,  $\mathcal{D}(E) = \mathcal{D}$ . La ecuación (3.5) se simplifica entonces a:

$$\varepsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \mathcal{V}(\mathcal{E}) \left( \varepsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} + e n_0 \right) - \varepsilon \mathcal{D} \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial x^2} = j(t), \quad 0 < x < \ell, \quad t > 0 \quad (3.6)$$

donde  $\ell$  es la longitud del semiconductor. Ahora la densidad de corriente total sólo depende del tiempo. Suponiendo que el dispositivo puede considerarse como un circuito puramente resistivo acoplado a una batería con voltaje constante,  $\phi$ , se verificará:

$$\int_0^\ell \mathcal{E} dx + j(t) R_1 = \phi \quad (3.7)$$

donde  $R_1 > 0$ , con unidades de (Ohm)  $\text{cm}^2$ , puede ser elegido arbitrariamente pequeño. Ignorando los detalles locales en las regiones metal-semiconductor, la región de los contactos se puede tratar de una forma fenomenológica como una región infinitesimal con una característica corriente-campo eléctrico conocida,  $j_{con}(\mathcal{E})$ . En este caso, la corriente de desplazamiento más  $j_{con}(\mathcal{E})$  debe ser igual a la corriente total,  $j(t)$ , ya que en los contactos no se crea ningún tipo de corriente [SGS79]:

$$\varepsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + j_{con}(\mathcal{E}) = j(t) \quad (3.8)$$

Para contactos puramente óhmicos se verifica,  $j_{con} = \mathcal{E}/\alpha$ , donde  $\alpha \geq 0$  es la resistividad de los contactos en  $x = 0$  y  $x = \ell$ . La idea de utilizar este tipo de condiciones de contacto que relacionan localmente la corriente electrónica con el campo eléctrico fue originalmente desarrollada por Kroemer [Kro68]. En particular  $\alpha$  es la inversa de la pendiente de la curva característica corriente-campo eléctrico en los contactos, para un valor apropiado del campo eléctrico [Bon92a, Bon92b].

Por otra parte, las condiciones iniciales del problema son:

$$\mathcal{E}(x, 0) = f(x) \geq 0, \quad 0 < x < \ell \quad (3.9)$$

Las ecuaciones (3.6)–(3.9) constituyen un problema matemático bien puesto, (ver existencia global, unicidad y propiedades de suavidad en [Lia94]). En este punto, existen dos posibles situaciones físicas que dan lugar a dos problemas matemáticos distintos [Bon91]:

1. El *problema directo*, que corresponde desde un punto de vista físico, a una condición de corriente constante y consiste en la resolución de (3.6), (3.8) y (3.9) para un valor conocido y constante de  $j(t)$ . Una vez conocido  $\mathcal{E}$ , se puede determinar el voltaje mediante (3.7).
2. El *problema inverso*, que corresponde desde un punto de vista físico, a una condición de voltaje constante y consiste en la resolución de (3.6), (3.8) y (3.9) para un valor desconocido de  $j(t)$ , de forma que (3.7) produzca un  $R_1 \rightarrow 0$ . La denominación de problema “inverso” se debe a que (3.6) contiene una incógnita,  $j(t)$ , cuya determinación es parte del problema.

El problema inverso es matemáticamente mucho más rico que el directo, por lo que será el único que se tratará aquí.

### 3.4.1 Adimensionalización del Problema

Es muy conveniente que el primer paso en el estudio de las estructuras espacio-temporales no lineales, sea reescribir la ecuaciones que gobiernan los procesos y las condiciones frontera e iniciales en forma adimensional, ya que en las ecuaciones adimensionales es más fácil encontrar un límite distinguido relevante y hacer un análisis asintótico, [Bon91].

Ya que nuestro principal interés es el efecto Gunn, se adoptará el valor máximo de la velocidad  $\mathcal{V}_M$  y el valor del campo eléctrico para el cual se produce  $\mathcal{E}_M$ , como unidades para la velocidad y el campo eléctrico, respectivamente. Claramente, el dopaje  $n_0$  es una unidad razonable para la densidad electrónica, la cual varía en el orden de  $n_0$  durante las oscilaciones Gunn. También se necesitan unidades para la longitud, tiempo y densidad de corriente. Hay diferentes candidatos para las unidades de longitud. El lado derecho de la ecuación de Poisson (3.1) es de orden  $e n_0 / \epsilon$ . En el lado izquierdo, la variación del campo eléctrico es de orden  $\mathcal{E}_M$  de tal forma, que la escala de longitud sobre la cual esta variación es comparable al término  $e n_0 / \epsilon$  es:

$$l_1 = \frac{\epsilon \mathcal{E}_M}{e n_0} \quad (3.10)$$

La escala temporal se puede obtener, imponiendo que la convección electrónica sea comparable a la corriente de desplazamiento de Maxwell en la ley de Ampère. Esto es lo mismo que balancear  $\partial n / \partial t$  y la corriente de convección en la ecuación de continuidad de carga (3.3). De esta forma, la escala temporal se puede entender como el tiempo que toma un electrón en desplazarse una distancia  $l_1$ , a una velocidad característica  $\mathcal{V}_M$ :

$$t_1 = \frac{l_1}{\mathcal{V}_M} = \frac{\epsilon \mathcal{E}_M}{e n_0 \mathcal{V}_M} \quad (3.11)$$



De esta forma, se pueden realizar las siguientes definiciones:

$$E = \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_M}, \quad V(E) = \frac{\mathcal{V}(\mathcal{E}_M E)}{\mathcal{V}_M}, \quad N = \frac{n}{n_0}, \quad X = \frac{x}{l_1}, \quad T = \frac{t}{t_1}. \quad (3.12)$$

Insertando (3.12) en (3.6)–(3.9) se obtiene:

$$\frac{\partial E}{\partial T} + V(E) \left( \frac{\partial E}{\partial X} + 1 \right) - \delta \frac{\partial^2 E}{\partial X^2} = J(T), \quad 0 < X < L, \quad T > 0 \quad (3.13)$$

$$\int_0^L E dX = \tilde{\Phi} \quad (3.14)$$

$$E = \rho \left( J - \frac{\partial E}{\partial \tau} \right) \quad \text{en} \quad X = 0, L \quad (3.15)$$

$$E(X, 0) = f(X) \geq 0, \quad 0 < X < L \quad (3.16)$$

donde se han introducido las variables adimensionales:  $\delta$  difusividad,  $J(T)$  densidad de corriente,  $L$  longitud del semiconductor,  $\tilde{\Phi}$  voltaje constante y  $\rho$  resistividad en los contactos (se asume que es igual en ambos contactos), definidas mediante las siguientes relaciones:

$$\delta = \frac{\mathcal{D} e n_0}{\varepsilon \mathcal{E}_M \mathcal{V}_M}, \quad J(T) = \frac{j(t_1 T)}{e n_0 \mathcal{V}_M}, \quad L = \frac{\ell}{l_1}, \quad \tilde{\Phi} = \frac{\phi}{l_1 \mathcal{E}_M}, \quad \rho = \frac{\alpha e n_0 \mathcal{V}_M}{\mathcal{E}_M}. \quad (3.17)$$

Para el resto de esta sección, se considerará un dispositivo semiconductor como el mostrado en la Figura 1.2 con contactos planos en  $X = 0$  (el cátodo) y  $X = L$  (el ánodo). Los patrones de campo eléctrico que se forman dependen de la coordenada  $X$  dirigida a lo largo del flujo de electrones  $\vec{J}$ .

Valores típicos para el GaAs son:  $\mathcal{E}_M = 3200$  V/cm,  $\mathcal{V}_M = 2.2 \times 10^7$  cm/s,  $D = 200$  cm<sup>2</sup>/s,  $\varepsilon = 12.5 \varepsilon_0$ ,  $\ell = 20$   $\mu$ m,  $n_0 = 10^{15}$  cm<sup>-3</sup>. En este caso  $\delta = 0.41$  y  $L = 72.82$ , de forma que podemos considerar  $\delta \ll 1$ , (notar que  $1/\delta$  es similar a el número de Reynolds).

En lugar de usar un voltaje adimensional, es conveniente adoptar un campo eléctrico medio,  $\Phi = \tilde{\Phi}/L$ , como el parámetro de voltaje constante, de forma que la ecuación (3.14) queda:

$$\frac{1}{L} \int_0^L E dX = \Phi \quad (3.18)$$

La razón de esto, es que  $L$  es típicamente grande (de 5 a 200 para n-GaAs), y queremos mantener nuestro parámetro de control  $\Phi$  de orden unidad cuando se describe la inestabilidad Gunn.

La adimensionalización realizada ha dejado un sistema de ecuaciones y condiciones que dependen sólo de tres parámetros adimensionales:  $\Phi$  (nuestro parámetro de control para la condición de voltaje constante),  $L$  (la relación de la distancia entre contactos y la longitud del dieléctrico  $l_1$ ), y  $\delta$  (un recíproco del número de Reynolds que también puede interpretarse como la relación entre la longitud difusiva,  $\mathcal{D}/\mathcal{V}_M$  y  $l_1$ ). En un diodo Gunn típico,  $\Phi$  es de orden unidad, mientras que  $\delta \ll 1$  y  $L \gg 1$ .



La simplificación crucial que se utilizará en lo que sigue es que  $L \gg 1$ . Como se verá, en este límite siempre es posible obtener el efecto Gunn para valores de  $\Phi$  más grandes que un determinado valor crítico. Las ondas, (dipolos de carga móvil), son en este caso mucho menores que la distancia entre contactos, lo cual permite una descripción asintótica simple del problema.

Debido a la adimensionalización realizada con la velocidad  $V(E)$ , el valor del máximo de la misma será la unidad y estará localizado a un valor del campo  $E = 1$ . Se supondrá que la línea recta  $E/\rho$  intersecta con la curva de la velocidad de arrastre  $V(E)$  en su segunda rama (decreciente), para un valor del campo  $E_c > 1$ . Esta condición es necesaria en este modelo para describir el efecto Gunn. Así necesitamos resistividad en los contactos  $\rho > 1$ . Para la realización de los cálculos, se adoptará la siguiente velocidad electrónica en forma de  $\mathcal{N}$  debida a Kroemer [Kro66]:

$$V(E) = \frac{V_0 E}{E_0} \left[ \frac{1 + B \left( \frac{E}{E_0} \right)^K}{1 + \left( \frac{E}{E_0} \right)^K} \right] \quad (3.19)$$

donde,

$$E_0 = \left[ \frac{2B}{K-1 - (K+1)B - R} \right]^{\frac{1}{K}}, \quad \frac{V_0}{E_0} = \frac{(K-1)(1-B) - R}{[(K+1)(1-B) - R]B},$$

$$R = \sqrt{[K-1 - (K+1)B]^2 - 4B}, \quad 0 < B < \left( \frac{K-1}{K+1} \right)^2$$

Otro caso importante, es una curva de velocidad que satura a un valor constante  $B$  cuando el campo aumenta, pasado un valor máximo. Un ejemplo de esto es:

$$V(E) = \frac{V_0 E}{E_0} \left[ \frac{1 + B \left( \frac{E}{E_0} \right)^{K-1}}{1 + \left( \frac{E}{E_0} \right)^K} \right] \quad (3.20)$$

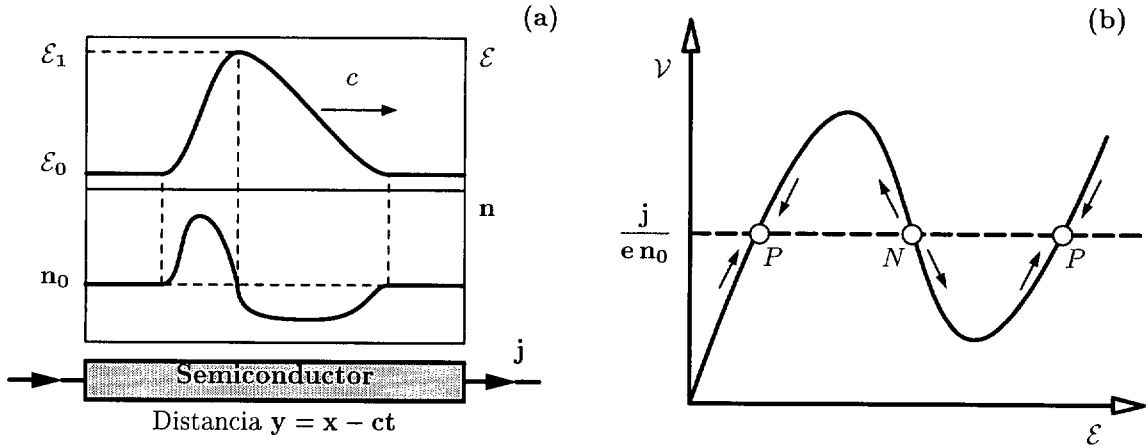
donde,

$$E_0 = [K(1-B) - 1]^{\frac{1}{K}}, \quad V_0 = \frac{K(1-B)}{[K(1-B) - 1]^{1-\frac{1}{K}} + B}, \quad 0 \leq B < 1 - \frac{1}{K}$$

### 3.5 Estabilidad

En esta sección analizaremos la estabilidad de un elemento NDC y para ello, se investigará su comportamiento ante fluctuaciones de la carga. Inicialmente y a modo de introducción, realizaremos un simple estudio cualitativo de dicho proceso.

Sea el caso donde la NDC es consecuencia de la movilidad diferencial negativa (NDM), de forma que existe un rango de valores del campo eléctrico donde  $dV/d\mathcal{E} < 0$ . Ejemplos de este estilo aparecen en los semiconductores del tipo  $n$ , donde la movilidad de la carga está afectada por la transferencia intervalle [Sha79].



**Figura 3.2:** (a) Esquema de un caso simple de inestabilidad en un semiconductor producida por NDM. En la gráfica superior, se muestra el perfil del campo eléctrico y en la gráfica inferior la distribución de la densidad de carga. (b)

Para ilustrar la respuesta de un elemento NNDC a una fluctuación de carga (formación de un dominio de campo alto), consideremos el problema unidimensional de un trozo de semiconductor, (dimensiones  $a \times b \times \ell$  con  $\ell \gg a, b$ ), con propiedades NNDC, sometido a un determinado voltaje constante. Supongamos entonces, que existe un campo eléctrico uniforme con un dominio de campo alto en el centro del mismo, como muestra la gráfica superior de la Figura 3.2-(a), mostrándose la distribución de carga que produce esta fluctuación del campo, en la gráfica inferior de la misma figura. Como puede observarse, existe una acumulación de carga neta en el lado izquierdo del dominio y una zona de disminución de carga en el lado derecho.

Si consideramos los portadores de carga como positivos, entonces tanto los portadores como el dominio se moverán de izquierda a derecha. Si inicialmente el campo dentro del dominio (zona  $\mathcal{E}_0 < \mathcal{E} < \mathcal{E}_1$ ), está dentro del rango NDC y el campo fuera del dominio (zona  $\mathcal{E} \sim \mathcal{E}_0$ ), está dentro de rango óhmico pero cercano al valor del campo correspondiente al pico máximo de la velocidad, (ver Figura 3.2-b), entonces la fluctuación crecerá con el tiempo. Esto es debido a que la parte creciente del campo en el centro del dominio se mueve más lentamente que aquellas partes que se encuentran en los extremos, donde el campo es menor. La carga por tanto, decrecerá en la parte derecha del dominio, (que denominaremos *frente*) y se acumulará en el lado izquierdo, (que denominaremos *cola*), haciendo aumentar el campo del valor máximo del dominio. Si el elemento está en un circuito resistivo a voltaje constante, un aumento en el tamaño del dominio hará aumentar el voltaje a través del mismo, y disminuir la corriente en el circuito, ecuación (1.4), disminuyendo también el campo fuera del dominio, ecuación (1.3). De esta forma, el campo continuará creciendo en el interior del dominio y disminuyendo fuera de él.

Para tiempos suficientemente grandes, el dominio crecerá hasta que su velocidad sea igual a la velocidad de las cargas fuera del dominio, lo cual es posible en el caso NNDC que nosotros consideramos. La velocidad final del dominio depende de la línea de carga del circuito. Si la fluctuación original del campo fuera producida por un dopaje no uniforme, el campo decreciente cercano al punto de la nucleación que se origina después de que el dominio se mueve, impediría la nucleación de siguientes dominios. Esta situación permanecería así, hasta que el dominio alcance el lado derecho del elemento, donde éste desaparecería.

El campo entonces provocaría la nucleación de otro dominio, resultando en una oscilación periódica de la corriente, [Gun64].

### 3.6 Estudio analítico

En esta sección detallaremos algunos cálculos de órdenes de magnitud de los dominios del efecto Gunn que, esencialmente, aparecieron en los años 1960. Dejaremos fuera de nuestras consideraciones tanto la condición de voltaje constante como las condiciones de contorno, igual que hicieron los primeros autores (Butcher [But67], Butcher y Fawcett [BF66], Knight y Peterson [KP66, KP67], Kroemer [Kro66], McCumber y Chynoweth [MC66] y Bonch-Bruевич y colaboradores [BBK65, BB66a, BB66b]). Partimos de una porción de semiconductor homogéneo unidimensional que posee una característica NNDC producida por un mecanismo NDM arbitrario, en condiciones isotérmicas y sin campo magnético presente. Supongamos que se produce una pequeña fluctuación de la carga en una región pequeña del semiconductor y que, fuera de ella, la densidad de carga es cero y el campo eléctrico toma un valor constante  $\mathcal{E}_0$ , sobre la rama de NDC de la velocidad electrónica. Queremos apreciar si esta fluctuación crece o disminuye con el tiempo. Comencemos con la ecuación de Poisson para el campo eléctrico  $\delta\mathcal{E} = \mathcal{E} - \mathcal{E}_0$  en términos de la fluctuación de carga  $\delta n(x, t)$ :

$$\frac{\partial \delta\mathcal{E}}{\partial x} = \frac{e}{\epsilon} \delta n \quad (3.21)$$

Ahora linealizamos la ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n + \frac{\partial}{\partial x} [\mathcal{V}(\mathcal{E}_0) \delta n + n_0 \mathcal{V}'(\mathcal{E}_0) \delta\mathcal{E}] = \mathcal{D}(\mathcal{E}_0) \frac{\partial^2 \delta n}{\partial x^2} \quad (3.22)$$

Si ignoramos la difusión para simplificar el problema, y sustituimos el campo  $\delta\mathcal{E}$  mediante la ecuación (3.21), obtenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \delta n + [\mathcal{V}(\mathcal{E}_0) \frac{\partial}{\partial x} \delta n = -\frac{en_0 \mathcal{V}'(\mathcal{E}_0)}{\epsilon} \delta n \quad (3.23)$$

donde hemos escrito  $\mathcal{V}_0 = \mathcal{V}(\mathcal{E}_0)$  y  $\mathcal{V}'_0 = \mathcal{V}'(\mathcal{E}_0)$ . La solución de esta ecuación es:

$$\delta n(x, t) = \delta n(x - \mathcal{V}_0 t, 0) \exp\left(-\frac{en_0 \mathcal{V}'_0}{\epsilon} t\right) \quad (3.24)$$

Análogamente, la perturbación del campo eléctrico es de la forma:

$$\delta\mathcal{E}(x, t) = \delta\mathcal{E}(x - \mathcal{V}_0 t, 0) e^{-\frac{t}{\tau}} \quad , \quad \tau = \frac{\epsilon}{en_0 \mathcal{V}'_0} \quad (3.25)$$

Claramente, la perturbación de la carga y del campo crecerá si  $dv/d\mathcal{E} < 0$  y decrecerá si  $d\mathcal{V}/d\mathcal{E} > 0$ . Si definimos el *factor de crecimiento*  $G$ , como el cociente entre la perturbación del campo, después de que atraviese todo el semiconductor, y su valor inicial, tenemos:

$$G = \frac{\delta\mathcal{E}(\bar{x}, \ell/\mathcal{V}_0)}{\delta\mathcal{E}(\bar{x}, 0)} \approx e^{\frac{\ell}{\mathcal{V}_0 |\tau|}} = \exp\left[\frac{\ell n_0 e |d\mathcal{V}/d\mathcal{E}|}{\epsilon \mathcal{V}_0}\right] \quad (3.26)$$

El crecimiento apreciable, es decir, la aparición de una inestabilidad de carga espacial, tendrá lugar si el exponente de la ecuación (3.26) es mayor que la unidad, y por tanto cuando:

$$n_0 \ell > \frac{\epsilon \mathcal{V}_0}{e |d\mathcal{V}/d\mathcal{E}|} \quad (3.27)$$

Este resultado clásico, es conocido con el nombre de *criterio N-L de Kroemer* y suele ser útil para determinar de forma aproximada en qué dispositivos es posible encontrar el efecto Gunn. McCumber y Chynoweth dieron expresiones más precisas en 1966. Aunque esta derivación dista de ser rigurosa, el criterio de Kroemer da correctamente el orden de magnitud de la longitud mínima que necesita tener un dispositivo para que presente el efecto Gunn.

### 3.6.1 La Regla de Áreas Iguales

Otra de las contribuciones analíticas importantes hecha en los años 60, referente a la velocidad de un dominio que se mueve en un semiconductor infinito con corriente constante, es la conocida como *regla de las áreas iguales*, debida a Butcher y Bonch-Bruevich. Ésta se puede deducir con cierta facilidad a partir de la ecuación de Ampère para la corriente total:

$$j = en\mathcal{V}(\mathcal{E}) - e\mathcal{D}(\mathcal{E}) \frac{\partial n}{\partial x} + \epsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} \quad (3.28)$$

A partir de ella, buscaremos soluciones con un dominio de campo alto que se propaga con las siguientes características:

1. con velocidad del dominio constante.  $\mathcal{V}_d$
2. sin cambio de forma.
3. rodeado por un material neutro con  $n = n_0$ ,  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_\infty$

El campo fuera del dominio es solución de  $j = en_0\mathcal{V}(\mathcal{E})$ , y lo denotaremos por  $\mathcal{E}_\infty$ . Aproximadamente, tenemos que  $\mathcal{V}_\infty = \mu_0 \mathcal{E}_\infty(t)$ , siendo  $\mu_0$  la movilidad del campo bajo. Consideraremos que  $\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}(x - \mathcal{V}_d t) = \mathcal{E}(Y)$ , donde  $Y = x - \mathcal{V}_d t$ . Como  $\partial \mathcal{E} / \partial x = d\mathcal{E} / dY$  y  $\partial \mathcal{E} / \partial t = -\mathcal{V}_d d\mathcal{E} / dY$ , la ecuación de Poisson queda:

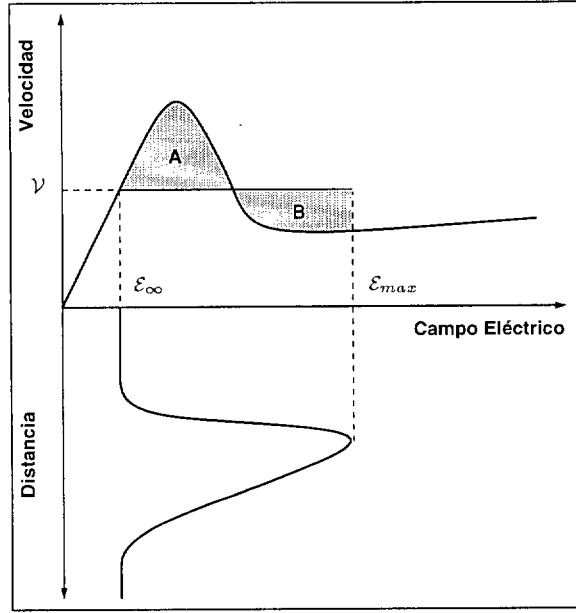
$$\frac{d\mathcal{E}}{dY} = \frac{e}{\epsilon} (n - n_0) \quad (3.29)$$

y la ecuación (3.28) se transforma en:

$$\mathcal{D}(\mathcal{E}) \frac{dn}{dY} = n [\mathcal{V}(\mathcal{E}) - \mathcal{V}_d] - n_0 (\mathcal{V}_\infty - \mathcal{V}_d) \quad (3.30)$$

Las ecuaciones (3.29) y (3.30) describen un sistema dinámico plano cuyo plano fásico depende del valor de  $\mathcal{V}_\infty$ . Existen dos puntos críticos  $(\mathcal{E}_\infty, n_0)$  y  $(\mathcal{E}_2, n_0)$  si la velocidad electrónica tiene dos ramas. El primer punto crítico es un punto silla para cualquier valor de  $\mathcal{V}_\infty$ , mientras que el carácter del segundo punto depende de este parámetro. Un dominio de campo alto corresponde a una órbita homoclínica que entra y sale de la silla. Para calcular el único valor de  $\mathcal{V}_\infty$  que nos proporciona la órbita homoclínica procederemos como sigue. Eliminamos la variable  $Y$  dividiendo la ecuación (3.30) por la ecuación (3.29), obteniéndose:

$$\frac{e(n - n_0)}{\epsilon n} \frac{dn}{d\mathcal{E}} = \frac{\mathcal{V}(\mathcal{E}) - \mathcal{V}_d}{\mathcal{D}(\mathcal{E})} - \frac{\mathcal{V}_\infty - \mathcal{V}_d}{n \mathcal{D}(\mathcal{E})} \quad (3.31)$$



**Figura 3.3:** Curvas de la velocidad frente al campo eléctrico (gráfico superior) y campo eléctrico frente a la distancia (gráfico inferior), utilizados para demostrar la regla de las áreas iguales, para un dominio móvil. Las áreas  $A$  y  $B$  deben ser iguales.

Si integramos ambos miembros de esta ecuación con respecto al campo y dividimos el resultado por  $n_0$ , obtendremos:

$$\frac{n}{n_0} - \log \frac{n}{n_0} - 1 = \frac{\epsilon}{e n_0} \int_{\epsilon_\infty}^{\epsilon} \frac{\mathcal{V}(\epsilon) - \mathcal{V}_d}{\mathcal{D}(\epsilon)} d\epsilon - \frac{\epsilon (\mathcal{V}_\infty - \mathcal{V}_d)}{e} \int_{\epsilon_\infty}^{\epsilon} \frac{d\epsilon}{n \mathcal{D}(\epsilon)} \quad (3.32)$$

que cumple  $n = n_0$  cuando  $\epsilon = \epsilon_\infty$ . Si  $n(\epsilon)$  corresponde a la órbita homoclínica, debemos tener también que  $n(\epsilon_{max}) = n_0$  en el campo máximo del dominio. Tenemos pues:

$$\int_{\epsilon_\infty}^{\epsilon_{max}} \frac{\mathcal{V}(\epsilon) - \mathcal{V}_d}{\mathcal{D}(\epsilon)} d\epsilon - n_0 (\mathcal{V}_\infty - \mathcal{V}_d) \int_{\epsilon_\infty}^{\epsilon_{max}} \frac{d\epsilon}{n \mathcal{D}(\epsilon)} = 0 \quad (3.33)$$

El primer término es independiente de  $n$ , mientras que el segundo depende de si estamos integrando a lo largo de las ramas  $n > n_0$  o bien  $n < n_0$ . Por tanto cada término debe anularse por separado. Visto que la integral en el segundo término es positiva, debemos tener que  $\mathcal{V}_\infty = \mathcal{V}_d$ . Es decir, la velocidad del dominio debe ser igual a la densidad de corriente dividida por  $e n_0$ , que es la velocidad de los electrones fuera del dominio.

La anulación del primer término y la igualdad de  $\mathcal{V}_\infty$  y  $\mathcal{V}$ , producen la conocida regla de áreas iguales, deducida de forma independiente por Butcher y Bonch-Bruевич [But67, KP67, BF66, KP66]:

$$\int_{\epsilon_\infty}^{\epsilon_{max}} \frac{\mathcal{V}(\epsilon) - \mathcal{V}_d}{\mathcal{D}(\epsilon)} d\epsilon = 0 \quad (3.34)$$

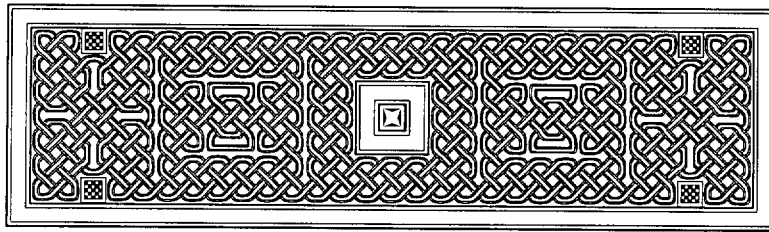
Para difusividad constante, esta ecuación nos da:

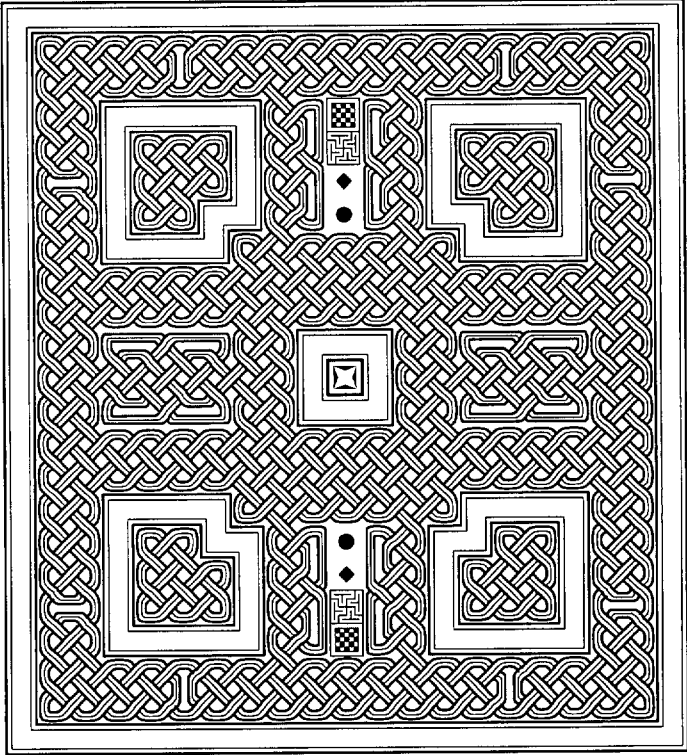
$$\int_{\mathcal{E}_{\infty}}^{\mathcal{E}_{max}} \mathcal{V}(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \mathcal{V}_d (\mathcal{E}_{max} - \mathcal{E}_{\infty}) \quad (3.35)$$

La ecuación (3.35) establece que el área bajo la curva  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  entre  $\mathcal{E}_{\infty}$  y  $\mathcal{E}_{max}$  debe ser igual a la del rectángulo,  $\mathcal{V}_d (\mathcal{E}_{max} - \mathcal{E}_{\infty})$ . Como muestra la Figura 3.3, esto se producirá únicamente si el área de la zona  $A$  es igual al área de la zona  $B$ . Así, el valor de  $\mathcal{E}_{max}$  se puede determinar para una velocidad  $\mathcal{V}_{\infty}$  (o, equivalentemente, para una corriente total) dada. La forma de la curva de velocidad electrónica, nos da los intervalos de posibles valores de la corriente y del campo, para los cuales existen dominios de campo alto.

Una vez caracterizados los dominios, debemos estudiar sus propiedades de estabilidad. Éstas últimas dependen de si mantenemos constante la corriente o el voltaje. En el primer caso, puede demostrarse que el dominio cuya velocidad hemos calculado es linealmente inestable [KP67]. Para verlo basta con linealizar la ecuación de Ampère alrededor del dominio y separar variables. La ecuación resultante se reduce a la de Schrödinger estacionaria tras un cambio de variable. Esta ecuación tiene como solución de energía cero, la derivada de la solución dominio (debido a su simetría traslacional). Como la solución dominio tiene un máximo, su derivada tiene un cero en  $Y$  finito y corresponde al primer estado excitado. Por tanto hay un estado fundamental con energía negativa, lo que da un modo inestable (y sólo uno). Físicamente, una ligera perturbación del dominio tiende a crecer o decrecer uniformemente si se mantiene la corriente constante.

La situación es diferente si se mantiene constante el voltaje en lugar de la corriente. No obstante, un estudio de esta situación requiere considerar tanto la condición de voltaje constante (u otras más generales para el circuito externo) como las condiciones de contorno en los contactos, donde los dominios se destruyen y regeneran. Este tipo de estudio es factible usando métodos de perturbaciones singulares como los que se describen en el siguiente capítulo de esta tesis.







# Análisis Asintótico del Efecto Gunn en Germanio tipo-p

## 4.1 Introducción



Un sistema particularmente interesante para el estudio de fenómenos espacio-temporales en el laboratorio es el germanio extrínseco tipo-p ultrapuro, a baja temperatura y en condiciones de voltaje constante, [TWH83, KMW91]. Entre los diferentes fenómenos que se pueden observar, el más característico es la aparición de oscilaciones de la corriente en circuitos puramente resistivos a voltaje constante, debido a la generación periódica de ondas solitarias en la zona de contacto de inyección (cátodo), su movimiento dentro del semiconductor y su aniquilación en el contacto de salida (ánodo) [KMW91]. Esencialmente, este fenómeno es el mismo que el efecto Gunn usual en n-GaAs [Gun64], pero en este caso la onda solitaria en el p-Ge se mueve mucho más lentamente que los portadores de carga, debido a que las dinámicas de generación-recombinación de las trampas ionizadas, son las dominantes dentro de las propiedades de transporte. Otros fenómenos experimentales interesantes que pueden observarse en este sistema son, la aparición de intermitencia cerca de la generación de las inestabilidades oscilatorias [KMW92b, KMW92c] y caos espacio-temporal bajo corriente alterna a voltaje constante [KMW92a]. Estos fenómenos han sido estudiados teóricamente mediante un modelo de convección-difusión [TWH83, WT85], que será explicado detalladamente en este capítulo.

El presente capítulo está organizado de la siguiente forma. En la Sección 4.2 se estudia la física del efecto Gunn en el germanio tipo-p, presentándose el modelo matemático de convección-difusión. En la Sección 4.3 se realiza la adimensionalización del modelo, obteniéndose la ecuación reducida, necesaria para la integración numérica del problema. Los aspectos del análisis numérico del problema se abordan de forma detallada en el Capítulo 5. En la Sección 4.4, introducimos nuestro escalamiento asintótico, derivamos las soluciones externas e internas y ponemos todas las piezas juntas, de forma que describan un periodo de la solución a través de la sucesión de sus diferentes estados. Por último, en la Sección 4.5 se discute el problema delicado de la separación de nuevas ondas a través de una inestabilidad de la capa límite cerca del contacto de inyección. Por otra parte, el Apéndice A contiene una demostración de la existencia global de soluciones positivas para el modelo completo de arrastre difusión con condiciones de contorno particulares.

## 4.2 Modelo del Germanio tipo-p

En esta sección se presenta una teoría sobre el transporte electrónico que tiene lugar en el Ge tipo-p, basada en el modelo de convección-difusión, y que tiene en cuenta los efectos no lineales que se producen. Estas no linealidades ocurren debido a la dependencia del campo eléctrico que poseen tanto, la velocidad de producción de huecos, (procesos de generación y recombinación), como la velocidad de convección. Los fenómenos no lineales que aparecen, son consecuencia de diferentes procesos microscópicos, entre los que se encuentran: colisiones de huecos neutros aceptores, atrapamiento de huecos libres dentro de sitios aceptores ionizados y emisión de fonones.

Nuestro objetivo, es desarrollar una descripción fenomenológica de estos procesos, de forma que pueda ser incluida en el modelo de convección-difusión y que sea compatible con la física microscópica predicha por la mecánica cuántica. Este tipo de modelización es apropiada cuando se desean resultados tanto cualitativos como semi-cuantitativos; en este caso nosotros buscamos un modelo que capture las características esenciales de un experimento, y sea suficientemente simple como para permitir predicciones analíticas.

Las ecuaciones del modelo de convección-difusión fueron desarrolladas en la Sección 3.3 bajo la suposición de pequeños campos eléctricos, de forma que la función de distribución sólo se perturba ligeramente de su valor de equilibrio. Pero cuando el campo aplicado aumenta, los efectos no lineales pueden llegar a ser importantes, y la función de distribución de huecos puede diferir significativamente de su valor de equilibrio. A esto se le conoce con el nombre de *calentamiento de portadores* [Reg85] y llega a ser importante cuando la velocidad de convección  $\mathcal{V}$  es del mismo orden que la velocidad térmica media  $v_t = [8k_b\mathcal{T}/m_*\pi]^{1/2} \simeq 2 \times 10^6$  cm/s, donde la temperatura  $\mathcal{T} = 4$  K y  $m_* = 0.35 m_0$  es la densidad media de los estados [WT85]. Se puede utilizar la movilidad de campo bajo  $\mu_0$ , (que puede llegar a alcanzar valores de hasta  $10^6$  cm<sup>2</sup>/V-s en Ge tipo-p ultrapuro a baja temperatura), para estimar el valor del campo donde el calentamiento de portadores llega a ser importante,  $v_t = \mu_0 \mathcal{E}$ . Esta simple estimación muestra que incluso valores pequeños del campo eléctrico, ( $\sim 1$ - $10$  V/cm), pueden producir un calentamiento de portadores significativo. En estos casos, es posible derivar un modelo de convección-difusión, donde las velocidades de convección y difusión son funciones del campo eléctrico,  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  y  $\mathcal{D}(\mathcal{E})$  [MRS90, SMSG92, Reg85]. Estas funciones pueden determinarse con exactitud, ajustando datos experimentales o datos procedentes de simulaciones Monte Carlo de las ecuaciones cinéticas; mediante técnicas perturbativas y de momentos no se consiguen buenos ajustes [MRS90, Bon93].

### 4.2.1 Dinámicas de Generación-Recombinación. Ecuaciones de Transporte

Las dinámicas más interesantes para el estudio de este sistema, surgen de la dependencia no lineal de la concentración de portadores con el campo eléctrico, y suelen denominarse inestabilidades del tipo *generación-recombinación* (g-r), siendo las variaciones de la concentración, consecuencia del atrapamiento y liberación de huecos por parte de los aceptores superficiales.

Por otra parte, los fenómenos más interesantes ocurren a bajas temperaturas, ya que la energía térmica no es suficiente para ionizar los aceptores, de forma que en estos casos, la aplicación de un campo eléctrico suficiente, puede producir una ionización dependiente del campo y por tanto, inestabilidades tipo *g-r*.

El aceptor superficial que se considera aquí es boro, con una energía de ligadura de 10 meV  $\sim$  116 K, realizándose normalmente los experimentos a una temperatura de 4 K, muy por debajo de la energía de ligadura, [Ber96].

En esta tesis se utiliza un modelo simplificado para el sistema formado por Ge tipo-p, suponiendo que el sistema es extrínseco, de forma que la corriente eléctrica es consecuencia exclusiva del movimiento de los huecos mayoritarios, [TBB95]. Se utilizará un modelo unidimensional, con la coordenada espacial a lo largo de la dirección del campo eléctrico aplicado y se supone que la conducción es paralela al campo aplicado; por tanto, las inestabilidades de carga no se producen perpendicularmente a la dirección de la conducción, y las perturbaciones transversales en la densidad de carga, decaen rápidamente mediante la relajación dieléctrica [Tei86]. Teniendo en cuenta la simetría de la muestra y la distribución de carga se puede integrar las componentes transversales de las variables dinámicas, dando lugar a un modelo unidimensional, [KMW91].

La ecuación de continuidad general, incluyendo los procesos de generación y recombinación de partículas, viene dada por la expresión [MRS90, Pou91]:

$$\nabla_x \cdot \mathcal{J}_n(x, t) + \partial_t n(x, t) = \mathcal{R}_{gen} - \mathcal{R}_{rec} \quad (4.1)$$

donde  $\mathcal{J}_n(x, t)$  es la densidad de corriente,  $n(x, t)$  la densidad de carga y  $\mathcal{R}_{gen}$  y  $\mathcal{R}_{rec}$  son las velocidades de generación y recombinación de partículas, respectivamente.

En nuestro caso, se considera un sistema unidimensional con conducción de huecos, de forma que se cambiará la notación de densidad de carga de  $n(x, t)$  a  $p(x, t)$  y la ecuación (4.1) se transforma en:

$$\frac{\partial \mathcal{J}_n(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \mathcal{R}_{gen} - \mathcal{R}_{rec} \equiv \left( \frac{\partial p}{\partial t} \right)_{g-r} \quad (4.2)$$

La densidad de corriente viene dada por una expresión modificada de la ecuación de convección-difusión:

$$\mathcal{J}_n(x, t) = p \mathcal{V}(\mathcal{E}) - \mathcal{D} \frac{\partial p}{\partial x} \quad (4.3)$$

donde se ha supuesto una velocidad de convección  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$  dependiente del campo y una difusividad  $\mathcal{D}$  independiente del mismo. Sólo vamos a considerar la generación y recombinación de un único nivel aceptor, de forma que la ecuación (4.2) se transforma en:

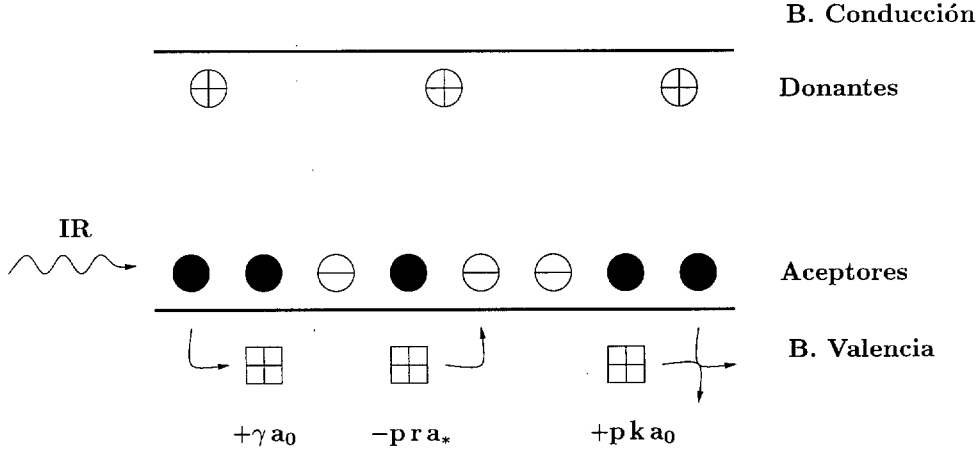
$$\frac{\partial \mathcal{J}_n(x, t)}{\partial x} + \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial a_*(x, t)}{\partial t} \quad (4.4)$$

donde  $a_*(x, t)$  es la concentración de aceptores ionizados. Cuando se tienen en cuenta tanto la concentración de los donantes de compensación, como la concentración de los aceptores, la ecuación de Poisson se transforma en:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} = \frac{e}{\epsilon} [p + d - a_*] \quad (4.5)$$

donde  $d$  es la concentración de los donantes de compensación. En la ecuación (4.5), se ha supuesto que la concentración de donantes es uniforme y, debido a la baja temperatura y la naturaleza extrínseca del material, que los donantes están completamente ionizados.





**Figura 4.1:** Diagrama de bandas del Ge tipo-p, ilustrando los procesos de captura e ionización: ● son los huecos correspondientes a la concentración de aceptores neutros  $a_0$ , ⊕ son los donantes ionizados (cargados positivamente) correspondientes a  $d$ , ⊖ son los aceptores ionizados (cargados negativamente) correspondientes a  $a_*$  y ⊞ son los huecos libres (cargados positivamente) correspondientes a  $p$ . Los huecos libres se generan a través de la fotoionización producida por radiación infrarroja lejana con una velocidad  $\gamma a_0$  y con una ionización por impacto con velocidad  $p k a_0$ . Los huecos libres se eliminan mediante recombinación con aceptores ionizados con una velocidad  $p r a_*$ , [Ber96].

Es posible obtener una única expresión útil a partir de las ecuaciones (4.4) y (4.5), como se explica a continuación. Se toma primero la derivada temporal de (4.5):

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial t \partial x} = \frac{e}{\epsilon} \left( \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial a_*}{\partial t} \right) \quad (4.6)$$

Teniendo en cuenta que el lado derecho de la ecuación anterior aparece en (4.4), la ecuación (4.6) se puede transformar en:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \epsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + e \left( p \mathcal{V} - \mathcal{D} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right] = 0 \quad (4.7)$$

Integrando con respecto a la posición y denominando a la constante de integración  $\mathcal{J}(t)$ , la ecuación (4.7) produce:

$$\mathcal{J}(t) = \epsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + e \left( p \mathcal{V} - \mathcal{D} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (4.8)$$

donde  $\mathcal{J}(t)$  representa la densidad de corriente independiente de la posición. La corriente total que fluye por el circuito externo, se puede obtener multiplicando  $\mathcal{J}(t)$  por la sección transversal de la muestra. Para completar el modelo de transporte, se necesita una expresión para el término  $(\partial a_*/\partial t)$  que aparece en la ecuación (4.4). La ecuación que describe las dinámicas de generación y recombinación de un único aceptor es una ecuación de velocidad simple, de la forma [WT85]:

$$\frac{\partial a_*}{\partial t} = \gamma a_0 + p [k(\mathcal{E}) a_0 - r(\mathcal{E}) a_*] \quad (4.9)$$

donde  $a_0$  es la concentración de aceptores neutros, y  $a = a_0 + a_*$  es la concentración de aceptores total. El término  $\gamma a_0$  describe la generación de aceptores ionizados a partir de aceptores neutros, mediante la absorción de radiación térmica e infrarroja lejana;  $\gamma$  es el coeficiente de fotoionización de un aceptor neutro, proporcional al flujo de fotones total y a la sección transversal. La velocidad de ionización por impacto de aceptores neutros es  $p k a_0$ , siendo  $k(\mathcal{E})$  el coeficiente de ionización por impacto, y  $p r a_*$  es la velocidad de recombinación de huecos en aceptores ionizados, siendo  $r(\mathcal{E})$  el coeficiente de recombinación.

En la Figura 4.1 se muestran esquemáticamente estos procesos en un diagrama de bandas de energía. Todo esto conduce al conjunto de EDP que describen la evolución de  $p(x, t)$ ,  $a_*(x, t)$ ,  $\mathcal{E}(x, t)$  y  $\mathcal{J}(t)$ :

$$\frac{\partial a_*}{\partial t} = \gamma a_* + p [a_0 k(\mathcal{E}) - a_* r(\mathcal{E})] \quad (4.10)$$

$$\mathcal{J}(t) = \epsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + e \left( p \mathcal{V}(\mathcal{E}) - \mathcal{D} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} = \frac{e}{\epsilon} (p + d - a_*) \quad (4.12)$$

#### 4.2.2 Coeficientes Fenomenológicos de Transporte

Los coeficientes  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$ ,  $k(\mathcal{E})$  y  $r(\mathcal{E})$  son funciones no lineales del campo eléctrico y son los responsables de las dinámicas interesantes que aparecen en el sistema. Los procesos de dispersión, (denominados en inglés *scattering*), que producen estas no linealidades son de naturaleza cuántica y el problema es por tanto, cómo incorporar estos efectos dentro de las ecuaciones clásicas de convección-difusión. La descripción cuántica de los procesos de dispersión depende de la energía y del vector de onda de los portadores, mediante la función de distribución, [MRS90]. En nuestro caso, describiremos los fenómenos de dispersión en términos del campo eléctrico, el cual puede ser relacionado con la energía y el vector de onda a través de la velocidad.

Por otra parte, en la aproximación estándar, los coeficientes se obtienen mediante la suposición de una determinada función de onda, [WT85], o mediante la utilización de una solución aproximada a la ecuación de Boltzmann, [Mit86], y posteriormente convolucionando la función de distribución con la sección transversal, dependiente de la energía de los procesos de dispersión, [RM89]. También se han utilizado cálculos Monte Carlo para relacionar la física microscópica de la dispersión, con las dinámicas macroscópicas descritas por las ecuaciones de transporte, [RM89, KHQ<sup>+</sup>93, QHSK94], sin embargo no existen aún tales simulaciones para muestras de Ge casi compensadas, que son las que se consideran aquí. También, otros autores han establecido diferentes formas de las curvas de los coeficientes basados en diferentes razones, [Sch88, Sch89b]. En cualquier caso, los coeficientes resultantes se pueden comparar con los datos experimentales disponibles de la velocidad de convección  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$ , [CNR85], y del coeficiente de recombinación  $r(\mathcal{E})$ , [KBS62]. En cuanto al coeficiente de ionización por impacto  $k(\mathcal{E})$ , no se conocen datos directos de su medida experimental, pero recientemente se han propuesto técnicas matemáticas para su determinación experimental de forma indirecta, [BHKP98], como se verá en el Capítulo 7.

Es importante recordar que la naturaleza cualitativa esencial del comportamiento de estos sistemas, la inestabilidad del perfil estacionario del campo eléctrico y la estabilidad de los

dominios móviles de campo alto, dependen sólo de la presencia de una función de densidad de corriente estacionaria con una pendiente negativa (NNDR), sobre un intervalo de campos positivos y no de la forma exacta de los coeficientes [Bon92a, BCBT94].

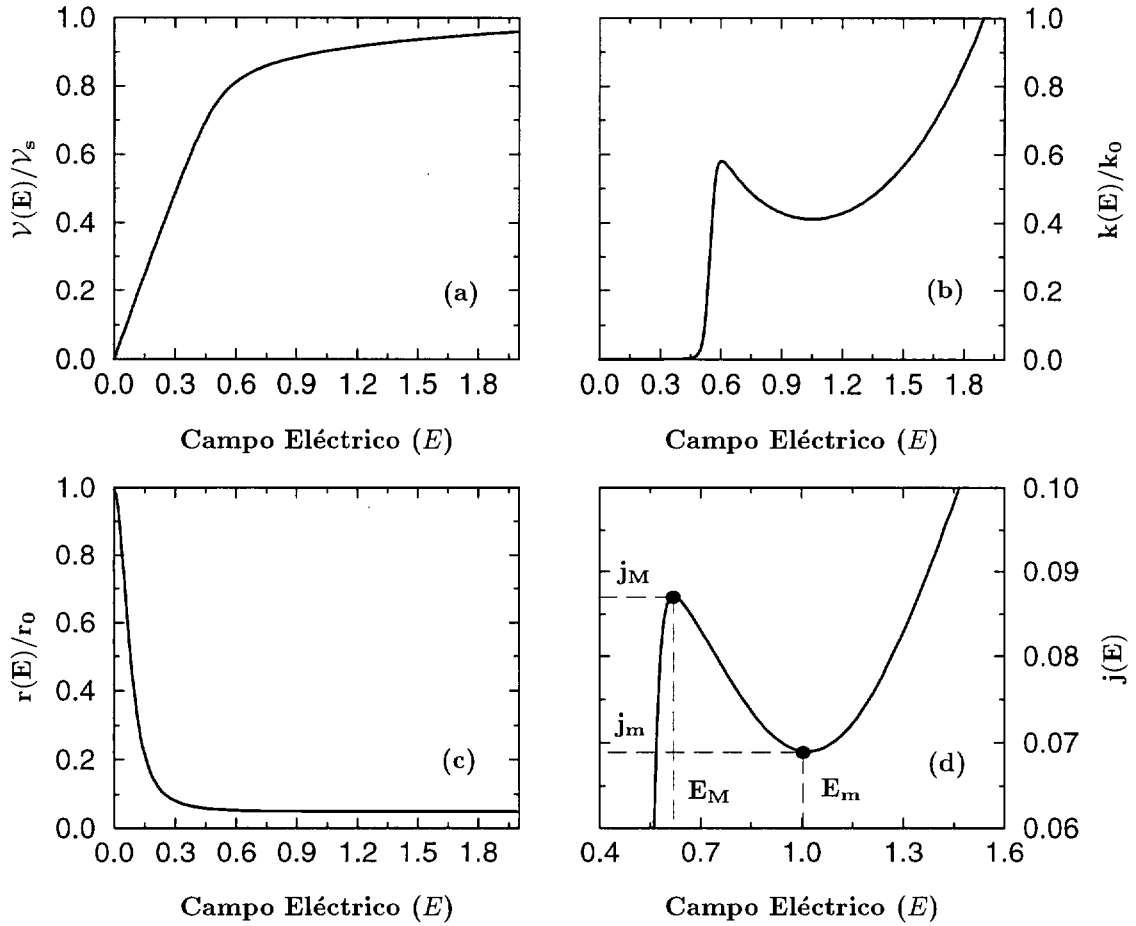
En las simulaciones realizadas en esta tesis se utilizarán los coeficientes fenomenológicos desarrollados por Westervelt y Teitsworth [WT85, Tei86], capaces de producir NNDR. El conjunto de expresiones desarrolladas por estos autores para  $\mathcal{V}(\mathcal{E})$ ,  $k(\mathcal{E})$  y  $r(\mathcal{E})$ , está basado en el calentamiento de portadores, y conduce a unas funciones de distribución Maxwelliana, con una temperatura de portador efectiva que puede ser mayor que la temperatura de la red. La forma funcional que posee los coeficientes según estos autores es la siguiente:

$$\mathcal{V}(E) = \mathcal{V}_s \left\{ 0.9(E + 0.33) + \frac{1.8}{\pi}(E - 0.5) \arctag[5.0 - 10.0E] + \frac{0.09}{\pi} \ln [1.0 + (5.0 - 10.0E)^2] \right\} \quad (4.13)$$

$$r(E) = r_0 \left\{ 0.05 + [1.04 + 100.0(E)^2]^{-1.5} \right\} \quad (4.14)$$

$$k(E) = k_0 \left\{ \left( 1.0 + \exp \left[ \frac{0.55 - E}{0.015} \right] \right)^{-1} \left( 0.25 + 2.0 \exp \left[ \frac{-E}{0.34} \right] \right) + 0.1 \left( \frac{E}{1.15} \right)^4 \right\} \quad (4.15)$$

Estas ecuaciones están definidas mediante el campo eléctrico adimensional  $E$ , descrito en la Sección 4.3.2. Los valores de  $\mathcal{V}_s$ ,  $r_0$  y  $k_0$  dados en la Tabla 4.1, son consistentes con los datos experimentales disponibles y los resultados Monte Carlo [Reg85]. La forma de estas funciones se muestran en la Figura 4.2. La función de la velocidad de convección mostrada en la Figura 4.2-(a) puede interpretarse como sigue: cuando el campo eléctrico está por debajo del valor crítico (del orden de 5 V/cm  $\sim$  0.5 en unidades adimensionales  $E$ ), la velocidad de convección aumenta linealmente de acuerdo a la aproximación estándar de movilidad de campo bajo, mientras que a campos más grandes la velocidad se acerca a su valor de saturación  $\mathcal{V}_s$ , debido a la generación de diversos procesos de dispersión de electrones calientes, especialmente la emisión óptica de fonones [CNR85]. Este comportamiento se refleja en la ecuación (4.13). El coeficiente de recombinación dado en la ecuación (4.14) y mostrado en la Figura 4.2-(c) es aproximadamente constante para pequeños campos y desciende como  $E^{-3}$  para valores altos de  $E$ , reflejando un decrecimiento en la captura de la sección transversal, cuando la energía cinética de los portadores libres aumenta. La forma del coeficiente de ionización por impacto mostrada en la Figura 4.2-(b), ecuación (4.15), puede entenderse de la siguiente forma: por debajo del campo crítico, la energía cinética media de los huecos libres es insuficiente para ionizar los aceptores neutros y por tanto, el coeficiente  $k$  tiende exponencialmente a cero. Cuando la energía media de los portadores alcanza la energía de las impurezas,  $k$  aumenta de forma abrupta. Estos dos comportamientos, son la base principal del proceso de ionización por impacto. Más allá del umbral de energía,  $k$  puede decrecer con el campo eléctrico debido a una disminución en la sección transversal, debida a la ionización por impacto [WT85]. Finalmente el coeficiente  $k$  debe aumentar de nuevo con el campo



**Figura 4.2:** Coeficientes fenomenológicos de transporte desarrollados por Westervelt y Teitsworth [WT85, Tei86], en su forma adimensional. (a) Velocidad de convección,  $v(E)$ . (b) Coeficiente de ionización por impacto,  $k(E)$ . (c) Coeficiente de recombinación o captura,  $r(E)$ . (d) Densidad de corriente homogénea estacionaria  $j(E)$  para un valor  $\alpha = 1.21$ , ilustrando la zona NDR de nuestro modelo.

como consecuencia de la aparición de diferentes procesos de ionización secundarios, como por ejemplo la ionización óptica de fonones.

Otros autores, [Sch88, Sch89b, Mit86], han deducido formas similares para las funciones  $r$  y  $k$  considerando diferentes procesos físicos. En esta tesis se utilizarán las ecuaciones (4.13)-(4.15) como formas funcionales razonables para la dependencia del campo de los coeficientes de transporte.

### 4.2.3 Condiciones Frontera

El conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (4.10)-(4.12) no determinan completamente  $p(x,t)$ ,  $a_*(x,t)$ ,  $\mathcal{E}(x,t)$  y  $\mathcal{J}(t)$ ; para obtener soluciones se deben especificar tanto condiciones iniciales como condiciones de frontera apropiadas. Estas ecuaciones de transporte son de segundo orden en espacio, de forma que serán necesarias dos condiciones frontera, (una en el ánodo y otra en el cátodo) y una condición inicial. En el Apéndice A, se

<i>Cantidad</i>	<i>Valor</i>
Concentración de aceptores superficiales	$a = 9.68 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
Concentración de donantes	$d = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
Índice de compensación	$\alpha \equiv a/d = 1.21$
Difusividad	$\mathcal{D} \equiv \mu_0 k_b \mathcal{T} / e = 3.6 \text{ cm}^2/\text{s}$
Velocidad de saturación	$\mathcal{V}_s = 1.0 \times 10^7 \text{ cm/s}$
Constante de ionización por impacto	$k_0 = 6.0 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{s}$
Constante de ionización por recombinación	$r_0 = 6.0 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{s}$
Movilidad de campo bajo de los huecos	$\mu_0 = 1.0 \times 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V s})$
Constante de generación por infrarrojos	$\gamma = 1.0 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
Resistividad en el contacto de inyección (cátodo)	$\rho_{con} = 585 \text{ } \Omega \text{ cm}$
Temperatura de la red	$\mathcal{T} = 4.2 \text{ K}$
Longitud de la muestra	$\ell = 1.45 \text{ cm}$
Área de la sección transversal de la muestra	$S = 0.16 \text{ cm}^2$
Permitividad en el vacío	$\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{N m}^2)$
Permitividad	$\epsilon = 16 \epsilon_0$
Carga elemental	$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Tiempo de relajación del dieléctrico	$t_1 \equiv \epsilon/(e d \mu_0) = 1.1 \times 10^{-10} \text{ s}$
Tiempo de ionización por impacto	$t_2 \equiv 1/(k_0 d) = 2.1 \times 10^{-6} \text{ s}$

**Tabla 4.1:** Parámetros físicos y escalas de tiempo utilizadas en el análisis y simulación numérica del sistema p-Ge, [Ber96].

demuestra que este es un problema bien puesto con soluciones positivas para todo tiempo, con las siguientes condiciones de frontera tipo Dirichlet, [BHH<sup>+</sup>97]:

$$p(0, t) = p_0, \quad p(\ell, t) = p_1 \quad (4.16)$$

donde los parámetros  $p_i$  son números positivos. Estas condiciones han sido consideradas anteriormente en [HW89]. H. Kroemer fue el primero en tratar la imperfección de las condiciones frontera en el efecto Gunn, introduciendo el concepto de contacto característico, [Kro68]. Las ideas de Kroemer y Grubin [Gru76], conducen a las siguientes condiciones frontera:

$$\epsilon \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} + \mathcal{J}_{con}(\mathcal{E}) = \mathcal{J}(t) \quad \text{en} \quad x = 0 \quad \text{y} \quad x = \ell \quad (4.17)$$

donde  $\mathcal{J}_{con}(\mathcal{E})$  es la característica corriente-campo eléctrico en los contactos. Para contactos con baja resistividad efectiva se acepta de forma general, el uso de una aproximación Óhmica para la característica en los contactos, de la forma:

$$\mathcal{J}_{con}(\mathcal{E}) = \frac{\mathcal{E}}{\rho_{con}} \quad \text{en} \quad x = 0 \quad \text{y} \quad x = \ell \quad (4.18)$$



donde  $\rho_{con}$  es la resistividad efectiva en los contactos, cuyo valor para nuestro caso, se muestra en la Tabla 4.1. Hay que tener muy en cuenta que estas condiciones de frontera óhmicas, pueden dar lugar a densidades de corriente negativas y a inestabilidades numéricas, a medida transcurre el tiempo. Las ecuaciones de transporte, (4.10)-(4.12) junto con las condiciones de frontera no especifican todas las incógnitas, ya que la densidad de corriente total está indeterminada. La densidad de corriente  $\mathcal{J}(t)$  se calcula a partir del tipo de voltaje aplicado. En el caso de voltaje constante,  $\mathcal{J}(t)$  representa una función específica del campo, la cual puede ser insertado en el modelo de transporte. Sin embargo, los experimentos de laboratorio normalmente utilizan voltaje constante, y en este caso se debe añadir la siguiente restricción integral del campo eléctrico:

$$\int_0^\ell \mathcal{E}(x, t) dx = \Phi(t) \quad (4.19)$$

donde  $\Phi(t)$  es el voltaje total aplicado. Esta expresión será la utilizada en esta memoria.

## 4.3 Adimensionalización del Modelo

### 4.3.1 Introducción

Las ecuaciones del modelo de transporte (4.10)-(4.12) no son una forma conveniente para el análisis o simulación. En ellas, no queda claro cuales son los términos dominantes, y no es aparente los tamaños de paso del tiempo y espacio que deberían utilizarse en la discretización de las ecuaciones en derivadas parciales, (EDP), para capturar correctamente la dinámica. Pero es posible convertir estas ecuaciones dimensionales a una forma adimensional donde se pueda identificar fácilmente los términos dominantes, y seleccionar las escalas apropiadas para la discretización espacial y temporal. Valores típicos y convenientes para estas cantidades son de orden unidad, en unidades adimensionales. Mediante la adimensionalización e identificación del término dominante, las tres ecuaciones (4.10)-(4.12) se pueden reducir a una única EDP, que denominaremos *ecuación reducida*, [TBB95]. El objetivo de esta ecuación reducida, es el de capturar la física esencial del modelo completo, al mismo tiempo que sea lo suficientemente simple para el análisis e integración numérica.

### 4.3.2 Adimensionalización

Como se ha comentado en la sección anterior, para obtener el modelo dinámico en su forma adimensional, primero se debe identificar convenientemente las escalas con las cuales se medirá el tiempo, la posición, el campo eléctrico y las diferentes concentraciones. Primeramente utilizaremos la ecuación de Poisson (4.12) para estimar una longitud típica,  $l_1$ , en la cual se produce un cambio en el campo eléctrico, debido a la variación de la densidad de carga. Teniendo en cuenta el campo eléctrico, se puede aproximar esta longitud mediante la velocidad de saturación como  $\mathcal{E} \sim \mathcal{V}_s/\mu_0$ , [BT91], de forma que las concentraciones se escalarán en términos de la concentración de donantes, obteniéndose:

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} = \frac{e}{\epsilon} (p + d - a_*) \quad (4.20)$$

$$\frac{\mathcal{V}_s/\mu_0}{l_1} \simeq \frac{e}{\epsilon} d \quad (4.21)$$

De esta forma:

$$l_1 = \frac{e \mathcal{V}_s}{e d \mu_0} \quad (4.22)$$

Utilizando los valores dados en la Tabla 4.1, podemos estimar el valor  $l_1 = 0.01$  mm. A partir de ahora, se considerará la variación de la densidad de carga sobre la longitud  $l_1$ . Sin considerar los procesos de generación-recombinación ni la corriente de difusión, la ecuación de continuidad (4.1), se puede aproximar de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{J}_{cond}}{dx} &= -\frac{dp}{dt} \\ \frac{d(pv)}{dx} &= -\frac{dp}{dt} \\ \frac{\Delta p \mathcal{V}_s}{l_1} &\simeq -\frac{\Delta p}{t_1} \end{aligned}$$

donde  $t_1 = \epsilon/(ed\mu_0) = 1.1 \times 10^{-10}$  s es el tiempo de relajación del dieléctrico, y representa una estimación del tiempo requerido para que las cargas muestren una perturbación en la distribución de carga. Este tiempo de relajación del dieléctrico es la primera escala de tiempo temporal importante de nuestro problema. La segunda escala temporal es el tiempo de ionización por impacto  $t_2$ , que se puede estimar a través de la ecuación de velocidad (4.12), como sigue:

$$\frac{d}{t_2} \simeq k_0 d^2 \quad (4.23)$$

obteniendo que  $t_2 = 1/(k_0 d) = 2.1 \times 10^{-6}$  s. La coordenada espacial se escalará con  $l_1$ , eligiendo como escala temporal el tiempo relativamente lento de ionización por impacto  $t_2$ , ya que la dinámica de los efectos que procuramos entender ocurren en esta escala de tiempo. La densidad de corriente se puede medir en términos de la densidad de corriente de saturación, y el escalado apropiado para la resistividad en los contactos, se consigue fácilmente a partir de las escalas de la densidad de corriente y del campo eléctrico. Finalmente, la velocidad dependiente del campo y los coeficientes de ionización por impacto y de captura, se miden en términos de la velocidad de saturación  $\mathcal{V}_s$  y la constante  $k_0$ , respectivamente.

En la Tabla 4.2 se muestran todas las variables adimensionales definidas en términos de cantidades dimensionales. A partir de ellas, las ecuaciones dimensionales (4.10)-(4.12) junto con la restricción integral (4.19), y las condiciones frontera (4.16), se transforman en el siguiente sistema de ecuaciones en forma adimensional [Bon92a]:

$$\frac{\partial A}{\partial T} = \frac{\Gamma}{\beta} (\alpha - 1 - A) + P [(\alpha - 1)K(E) - R(E) - [K(E) + R(E)] A] \quad (4.24)$$

$$\beta \frac{\partial E}{\partial T} = J - V(E)P + \delta \frac{\partial P}{\partial X} \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial E}{\partial X} = P - A \quad (4.26)$$

$$\phi = \frac{1}{L} \int_0^L E(X, T) dX \quad (4.27)$$

$$P(0, T) = P_0, \quad P(L, T) = P_1 \quad (4.28)$$

<i>Variable Adimensional</i>	<i>Definición</i>
Variable espacial	$X = x\mu_0ed/(\epsilon\mathcal{V}_s)$
Variable temporal	$T = t/t_2$
Campo eléctrico	$E(X, T) = \mathcal{E}(x, t)\mu_0/\mathcal{V}_s$
Concentración de huecos libres (carga positiva)	$P(X, T) = p(x, t)/d$
Concentración de aceptores ionizados (carga negativa)	$A(X, T) = a_*(x, t)/d - 1$
Voltaje	$\phi(T) = \Phi(t)\mu_0^2ed/(\epsilon\mathcal{V}_s^2)$
Densidad de corriente	$J(T) = \mathcal{J}(t)/(ed\mathcal{V}_s)$
Velocidad de convección	$V(E) = \mathcal{V}(E)/\mathcal{V}_s$
Coeficiente de ionización por Impacto	$K(E) = k(E)/k_0$
Coeficiente de recombinación	$R(E) = r(E)/k_0$
Resistividad en el contacto de inyección (cátodo)	$\rho_0 = \rho_{con}e\mu_0d$
Longitud de la muestra	$L = \ell\mu_0ed/(\epsilon\mathcal{V}_s)$
Parámetro $\beta$	$\beta = t_1/t_2 = 5.2 \times 10^{-5}$
Parámetro $\delta$	$\delta = \mu_0ed\mathcal{D}/(e\mathcal{V}_s^2) = 0.04$
Parámetro $\Gamma$	$\Gamma = \gamma\epsilon/(\mu_0ed) = 1.0 \times 10^{-12}$

**Tabla 4.2:** Definición de variables y parámetros adimensionales a partir de las variables dimensionales del sistema, [Ber96].

donde se han introducido los siguientes parámetros adimensionales:

$$\beta = \frac{t_1}{t_2} = 5.2 \times 10^{-5}$$

$$\delta = \frac{\mu_0ed\mathcal{D}}{e\mathcal{V}_s^2} = 0.04$$

$$\Gamma = \frac{\epsilon\gamma}{\mu_0ed} = 1.0 \times 10^{-12}$$

Las nuevas incógnitas adimensionales del sistema formado por las ecuaciones (4.24)-(4.27) son el campo eléctrico  $E(X, T)$ , la concentración de huecos  $P(X, T)$ , la concentración de aceptores ionizados  $A(X, T)$  y la densidad de corriente total  $J(T)$ .  $\phi$  es el voltaje (constante) aplicado. En la siguiente sección, se explotará la gran diferencia que hay entre las dos escalas de tiempo: el tiempo de relajación del dieléctrico  $t_1$  y el tiempo de ionización por impacto  $t_2$ , lo que produce un  $\beta \ll 1$ , para obtener una descripción simple de las dinámicas del sistema.

### 4.3.3 Ecuación Reducida

En esta sección, se obtendrá la aproximación de orden dominante de las ecuaciones (4.24)-(4.27), a través de la aplicación de la teoría de perturbaciones singulares, [BO78]. Recordemos que las variables de estas ecuaciones están escaladas de forma, que ninguna de sus derivadas varía rápidamente en el dominio de la muestra.

A continuación detallaremos el proceso a seguir. Inicialmente se fijan los parámetros pequeños  $\beta$ ,  $\delta$  y  $\Gamma/\beta$  a cero, obteniéndose la solución aproximada *externa*, [Bon92a, BHV94]. El nombre de “solución externa” proviene de la teoría de la capa límite, y representa una solución que varía lentamente en la mayoría del dominio, (la denominada región *externa*), excepto en un pequeño intervalo donde la solución varía rápidamente, (denominada *capa límite* o región *interna*), [BO78]. Es posible encontrar diferentes aproximaciones de las ecuaciones diferenciales, válidas tanto en la región interna como externa. Una vez obtenidas las soluciones apropiadas, se acoplan asintóticamente en una región intermedia donde ambas soluciones son válidas.

Vamos a analizar los efectos físicos que producen en nuestro sistema de ecuaciones, la eliminación de estos parámetros. Seleccionando  $\delta$  igual a cero en (4.24)-(4.27) se obtiene un conjunto de ecuaciones fundamentalmente distintas que cuando  $\delta$  es muy pequeño, pero distinto de cero. Esto es debido a que  $\delta$  está multiplicando a la derivada espacial de  $E$  de mayor orden (para darse cuenta de ello, basta con despejar  $P$  de (4.26) e introducirlo en (4.25)). Esto es una característica típica de la teoría de perturbaciones singulares aplicada a las ecuaciones diferenciales, y al tener un orden menor, producen soluciones externas que no satisfacen todas las condiciones impuestas en la ecuación diferencial original. En particular, cuando  $\delta$  se iguala a cero, la naturaleza de segundo orden de las ecuaciones (4.24)-(4.27) se reduce a una de primer orden, y sólo una de las condiciones frontera en (4.18) puede ser satisfecha. Por otra parte, despreciar el término  $\Gamma$  es razonable sólo para campos eléctricos por encima del nivel de impurezas. Por debajo de esto, el término de generación es esencial en la determinación de las propiedades de foto-conductividad, muy importantes en los dispositivos de p-Ge de interés práctico, [Tei89, Hal94]. Como conclusión, seleccionar los tres parámetros  $\beta$ ,  $\delta$  y  $\Gamma/\beta$  igual a cero, corresponde físicamente a despreciar la corriente de desplazamiento, la corriente de difusión y el término de generación por infrarrojos lejanos.

Por tanto, despreciando estos tres parámetros adimensionales, podemos eliminar las variables  $A$  y  $P$  en favor de  $E$  y sus derivadas. Para ello, de la ecuación (4.25) se obtiene  $P = J/V(E)$ , e introduciendo este valor en las ecuaciones (4.24) y (4.26), éstas se transforman en:

$$\frac{\partial A}{\partial T} = \frac{J [K(E) + R(E)]}{V(E)^2} [j(E) - V(E) A], \quad (4.29)$$

$$\frac{\partial E}{\partial X} = \frac{J}{V(E)} - A. \quad (4.30)$$

donde  $j(E)$  es la *densidad de corriente estacionaria*, [Bon92a, CBBT93, BTBC96], y viene dada por la fórmula:

$$j(E) = \left( \frac{\alpha K(E)}{K(E) + R(E)} - 1 \right) V(E) \quad (4.31)$$

Si la relación de compensación  $\alpha$ , (proporción de la concentración de aceptores y la concentración de donantes), es sólo ligeramente mayor que 1,  $j(E)$  tiene una forma de tipo  $\mathcal{N}$  para campos suficientemente grandes, [TBB95, Ber96]. En estos casos, existe un intervalo del campo eléctrico ( $E_M, E_m$ ) entre el eje de abscisas del máximo [ $j(E_M) = j_M$ ] y el mínimo [ $j(E_m) = j_m > 0$ ] para los cuales  $dj/dE < 0$  y  $j(E) > 0$ , como puede observarse en la Figura 4.2-(d).

Finalmente, para eliminar la variable  $A$  en favor de  $E$  en la ecuación (4.30), se despeja  $A$  y se inserta en (4.29), obteniéndose la siguiente EDP no lineal de tipo hiperbólico que denominaremos *ecuación reducida*, [BT91, Bon92a, Bon92b]:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial X \partial T} + J \frac{K(E) + R(E)}{V(E)^2} \left( \frac{V'(E)}{K(E) + R(E)} \frac{\partial E}{\partial T} + V(E) \frac{\partial E}{\partial X} + j(E) - J \right) = \frac{1}{V(E)} \frac{dJ}{dT} \quad (4.32)$$

El sistema del modelo reducido está formado por las ecuaciones (4.32) y (4.27) para  $E(X, T)$  y  $J(T)$ , junto con una condición inicial para  $E(X, 0)$  y la condición de frontera en el contacto de inyección (4.16), en su forma adimensional  $J(T) = P_0 V[E(0, T)]$ . De acuerdo a esta última ecuación, el campo eléctrico en el contacto es una función no lineal de la corriente. En [Bon92b] se demuestra que las oscilaciones estables de la corriente que se obtienen del sistema anterior, son cualitativamente como las soluciones de mismo problema reducido junto con la ley de Ohm:

$$E(0, T) = \rho J(T) \quad (4.33)$$

donde  $\rho > 0$  es la resistividad del contacto adimensional.

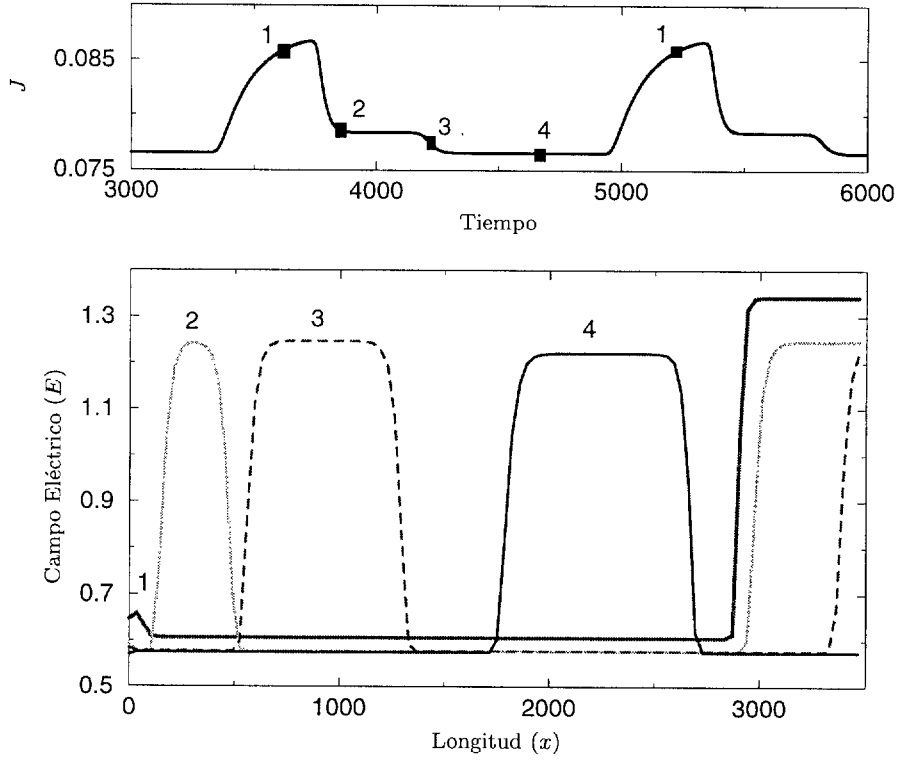
## 4.4 Análisis Asintótico

Aunque la mayoría del estudio asintótico de este sistema ya ha sido realizado, [BTBC96], ecuaciones básicas importantes concernientes a la descripción asintótica de sus soluciones estables están aun abiertas. En las siguientes secciones se presenta una descripción asintótica del efecto Gunn en p-Ge y la comparamos con el resultado obtenido con simulaciones numéricas.

En el Capítulo 5 se detalla el método numérico utilizado para la integración de la ecuación reducida (4.32). La Figura 4.3 muestra los resultados obtenidos con dicho método numérico, para un caso particular en el que la solución exhibe un comportamiento periódico. En ella, se muestra la distribución de campo para cuatro instantes de un ciclo completo. En el tiempo (1) una onda está desapareciendo en el extremo derecho y una nueva onda aparece en el extremo izquierdo. En el tiempo (2) la nueva onda crece muy rápido, produciendo una rápida disminución en la densidad de corriente, mientras que la vieja onda continúa desapareciendo. En el tiempo (3) el área de la nueva onda crece a una velocidad lenta para compensar el área perdida por la onda que está desapareciendo. Finalmente, en el tiempo (4) aparece la nueva onda totalmente desarrollada.

El objetivo de este análisis asintótico, es obtener un modelo analítico simple, capaz de aproximar el proceso cíclico de forma satisfactoria. Es conveniente para ello, redefinir las escalas de tiempo y espacio de tal forma que la longitud del semiconductor sea la unidad:

$$\epsilon = \frac{1}{L}, \quad y = \frac{X}{L}, \quad s = \frac{T}{L}. \quad (4.34)$$



**Figura 4.3:** Ciclo periódico producido en la intensidad de corriente y en la distribución del campo eléctrico, solución del problema reducido para los parámetros dados en la Figura 5.4

de forma que las ecuaciones (4.32), (4.27) y (4.33) se transforman respectivamente en:

$$J - j(E) = \epsilon \left( \frac{1}{K(E) + R(E)} \left[ V'(E) \frac{\partial E}{\partial s} - V(E) \frac{d \ln J}{ds} \right] + V(E) \frac{\partial E}{\partial y} \right) + \epsilon^2 \frac{V(E)^2}{J[K(E) + R(E)]} \frac{\partial^2 E}{\partial y \partial s} \quad (4.35)$$

$$\int_0^1 E(y, s) dy = \phi \quad (4.36)$$

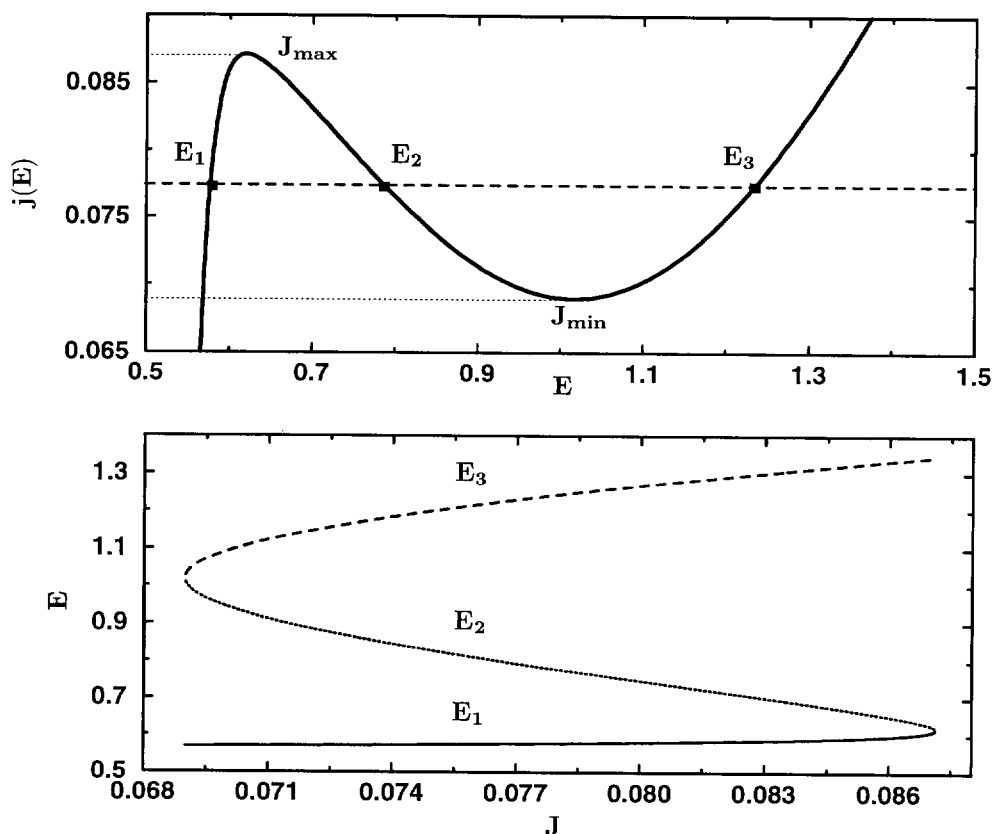
$$E(0, s) = \rho J(s) \quad (4.37)$$

Estas ecuaciones están definidas en términos de las variables lentas  $s = \epsilon T$  e  $y = \epsilon X$ . Describiremos la solución periódica en el tiempo de estas ecuaciones, en el límite  $\epsilon \rightarrow 0$  ( $L \rightarrow \infty$ ), mediante desarrollos asintóticos al orden dominante.

#### 4.4.1 Solución Externa

Claramente el término dominante, ( $\epsilon = 0$ ), del desarrollo externo de las soluciones de las ecuaciones (4.35) - (4.36) produce:

$$J - j(E) = 0. \quad (4.38)$$



**Figura 4.4:** Valores del campo eléctrico correspondientes a la solución externa. En el gráfico superior, se muestran la disposición de las tres posibles soluciones, para un determinado valor de  $J \in (J_{\min}, J_{\max})$  de la ecuación (4.38). En el gráfico inferior se muestra la representación gráfica de las tres soluciones como funciones de  $J$ .

El campo eléctrico externo es por tanto una función constante, definida a trozos, cuyo perfil es una sucesión de ceros de  $J - j(E)$ , separados por discontinuidades de la forma  $E_k(J)$  ( $k = 1, 2, 3$ ). Estas discontinuidades son frentes de onda viajeros, cuyas velocidades se pueden encontrar estudiando las soluciones interiores. Se puede demostrar fácilmente que  $E_1$  y  $E_3$  son soluciones estables, mientras que  $E_2$  es siempre inestable, [Bon91]. Por tanto, pares de estos frentes de onda limitan dos regiones donde el campo eléctrico en el interior vale  $E_3$  y en el exterior  $E_1$ , constituyendo *ondas solitarias*, las cuales son la base de nuestro estudio, ver Figura 4.5-(b). En la Figura 4.4 se muestra la determinación de las tres soluciones  $E_1$ ,  $E_2$  y  $E_3$ , para un valor de  $J$  dado, (gráfico superior), y la representación gráfica de las funciones  $E_1(J)$ ,  $E_2(J)$  y  $E_3(J)$  para el caso que aquí se estudia, (gráfico inferior).

#### 4.4.2 Soluciones Interiores

Cerca de  $y = 0$  o cerca de las discontinuidades móviles en el perfil de campo externo, existen regiones con variaciones rápidas del campo eléctrico. En ellas,  $J = J(s)$ ,  $E \sim F(X, T; s)$ , donde  $X = y/\epsilon$  y  $T = s/\epsilon$ , de acuerdo con la ecuación (4.34).

#### 4.4.2.1 Capa de Inyección

El campo en la *capa de inyección*, definida como la capa límite cerca de  $y = 0$ , obedece a las siguientes ecuaciones:

$$\frac{V(F)^2}{J(s)[K(F) + R(F)]} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial t} + \frac{J V'(F)}{V(F)^2} \frac{\partial F}{\partial t} \right) + V(F) \frac{\partial F}{\partial x} = J(s) - j(F) + \epsilon \frac{V(F)}{K(F) + R(F)} \frac{d \ln J}{ds} \quad (4.39)$$

$$F(0, t; s) = \rho J(s) \quad (4.40)$$

Excepto en intervalos de tiempo muy pequeños, en los que se forma una nueva onda,  $F = F(x; s)$  es un perfil cuasi-estacionario monótono decreciente que une  $F = \rho J(s)$  con  $F = E_1[J(s)]$ . Dicho perfil es solución de la ecuación:

$$V(F) \frac{\partial F}{\partial x} = J(s) - j(F). \quad (4.41)$$

#### 4.4.2.2 Frentes de Onda Viajeros

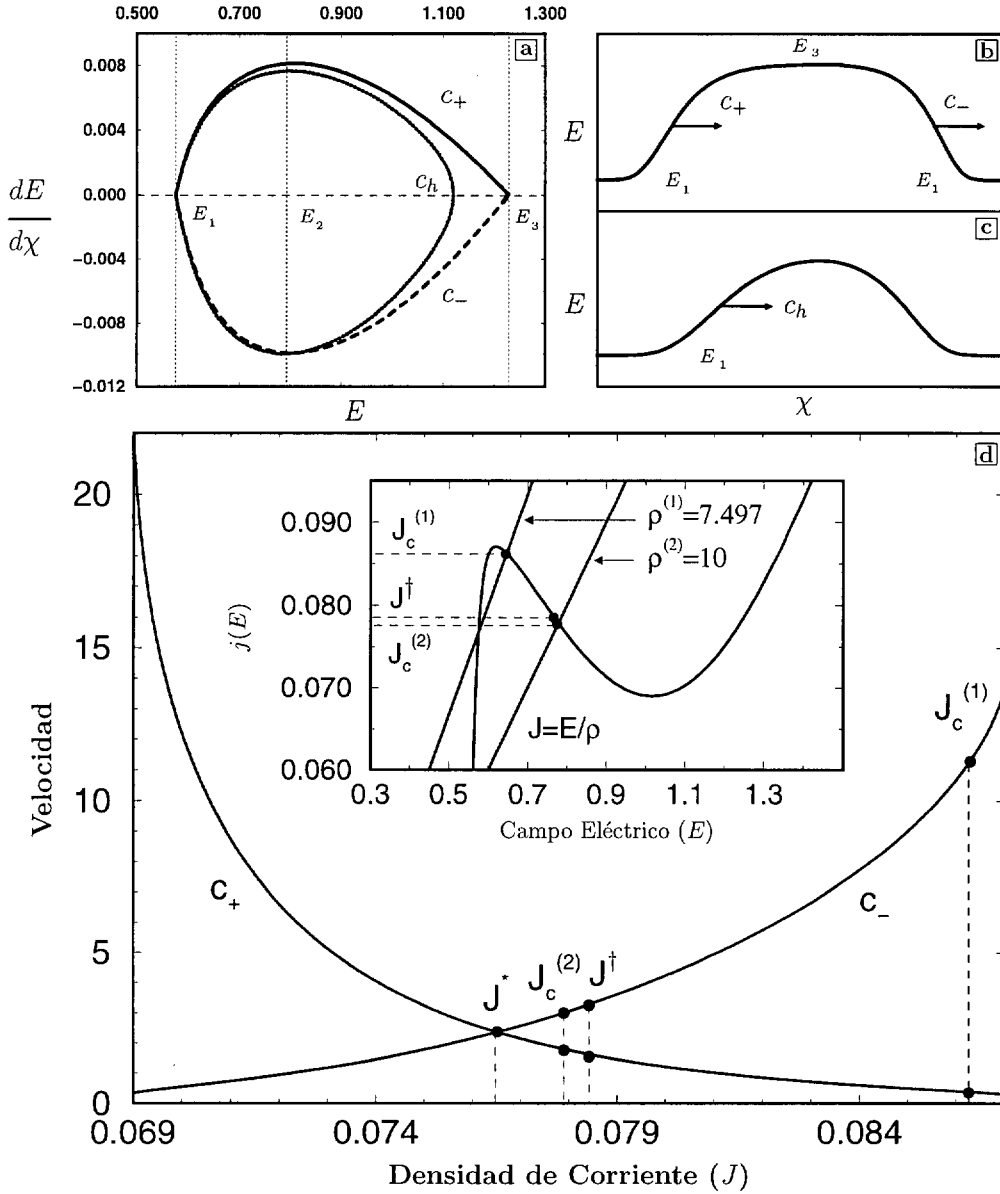
Cerca de una discontinuidad del perfil del campo eléctrico externo, localizado por ejemplo en  $y = Y(s)$ , el perfil del campo es un frente de onda viajero, solución de (4.39), de la forma  $F = F(\chi; s)$ , con  $\chi = [y - Y(s)]/\epsilon$  y  $dY/ds = c$ :

$$c \frac{\partial^2 F}{\partial \chi^2} + J(s) \frac{K(F) + R(F)}{V(F)^2} \left\{ \left[ \frac{c V'(F)}{K(F) + R(F)} - V(F) \right] \frac{\partial F}{\partial \chi} + J(s) - j(F) \right\} = 0 \quad (4.42)$$

Estos frentes de onda deberían unir los dos ceros estables de  $j(E) - J$ ,  $E_1(J)$  y  $E_3(J)$ . Para encontrarlos, se utiliza el siguiente procedimiento: (i) fijamos  $J(s) = J$ , (ii) variamos  $c(J)$  hasta que encontramos una solución de (4.42) que coincida con  $E_1(J)$  [ $E_3(J)$ ], cuando  $\chi = -\infty$  y a  $E_3(J)$  [ $E_1(J)$ ], cuando  $\chi = +\infty$ . De forma que existen dos frentes de onda, cada uno con una velocidad de onda dada  $c$ , que es función únicamente de  $J(s)$ , con las siguientes características:

- Una solución heteroclínica del plano de fase correspondiente a (4.42), uniendo los puntos silla  $(E_1(J), 0)$  y  $(E_3(J), 0)$  con  $\partial F / \partial \chi > 0$ . Para cada  $J \in (j_m, j_M)$  hay una solución tal con velocidad  $c_+(J)$ , ver Figura 4.5-(a).
- Una solución heteroclínica del plano fase correspondiente a (4.42), uniendo los puntos silla  $(E_3(J), 0)$  y  $(E_1(J), 0)$  con  $\partial F / \partial \chi < 0$ . Para cada  $J \in (j_m, j_M)$  hay una solución tal con velocidad  $c_-(J)$ , ver Figura 4.5-(a).





**Figura 4.5:** Soluciones del sistema Ge tipo-p del tipo ondas solitarias. (a) Plano fásico de la ecuación reducida (4.42), donde se observan los frentes de ondas viajeros: soluciones del tipo heteroclínica  $E_1 \mapsto E_3$  con velocidad  $c_+$  y heteroclínica  $E_3 \mapsto E_1$  con velocidad  $c_-$ . También se muestra la posible solución homoclínica  $E_1 \mapsto E_1$  con velocidad  $c_h$ , la cual no se han observado experimentalmente en este sistema. (b) Forma de la onda solitaria heteroclínica, mostrando la solución externa (base  $E_1$  y techo  $E_3$ ), y las soluciones externas formadas por los frentes de onda, con sus respectivas velocidades. (c) Forma de la posible onda solitaria homoclínica. (d) Velocidades  $c_+$  y  $c_-$  de los frentes de onda, como función de la densidad de corriente. El punto de intersección de ambas líneas es  $J = J^* \approx 0.076515$ . También aparecen marcados la corriente  $J^\dagger \approx 0.07840$  donde  $2c_+ = c_-$ . Los valores  $J_c^{(1)}$  y  $J_c^{(2)}$  son las corrientes críticas para las resistividades de las Figuras 4.7 y 4.8, respectivamente. El gráfico pequeño insertado, muestra la localización de  $J^\dagger$ ,  $J_c^{(1)}$  y  $J_c^{(2)}$  en la curva de densidad de corriente de la muestra,  $j(E)$ .

Las funciones  $c_+(J)$  y  $c_-(J)$  se muestran en la Figura 4.5-(d). Hay que destacar que ambas curvas intersectan en un valor  $J = J^*$ , definido como el valor de la corriente para el cual, una órbita homoclínica que une el punto  $(E_1, 0)$  consigo mismo, *colisiona* con el otro punto silla  $(E_3, 0)$ , [BT91].

#### 4.4.3 Poniendo Todas las Piezas Juntas

Comenzaremos en un tiempo en el cual sólo existe una onda solitaria en la muestra, lejos de los extremos, ver Figura 4.6-(a). Supondremos que  $E_M < \phi < E_m$  y  $E_M/j_M < \rho < E_m/j_m$ , correspondientes a la Figura 4.2-(d). En este caso, se producirá un efecto Gunn mediante una onda solitaria, como fue demostrado en [Bon92b]. El perfil de campo externo inicial es:

$$E(y, 0) = E_1(J) + [E_3(J) - E_1(J)][\theta(Y_2 - y) - \theta(Y_1 - y)] + O(\epsilon), \quad (4.43)$$

$$Y_2 - Y_1 = \frac{\phi - E_1(J)}{E_3(J) - E_1(J)} \quad (4.44)$$

Aquí  $Y_1$  e  $Y_2$ , con  $Y_1 < Y_2$ , son las posiciones de los frentes de onda que conectan  $E_1(J)$  y  $E_3(J)$ , ver Figura 4.6-(a). Fijando los valores de  $\phi$  y  $J(0)$ , de (4.44) se fija la anchura de la onda a tiempo  $s = 0$ ,  $Y_2(0) - Y_1(0)$ .  $\theta(x)$  es la función paso unidad:  $\theta(x) = 1$  si  $x > 0$ ,  $\theta(x) = 0$  si  $x < 0$ . El perfil de campo externo para  $s > 0$  está dado por (4.43) con  $J = J(s)$  e  $Y_i = Y_i(s)$  ( $i = 1, 2$ ). La localización de los frentes de onda están definidos por las ecuaciones:

$$\frac{dY_1}{ds} = c_+(J) \quad , \quad \frac{dY_2}{ds} = c_-(J) \quad (4.45)$$

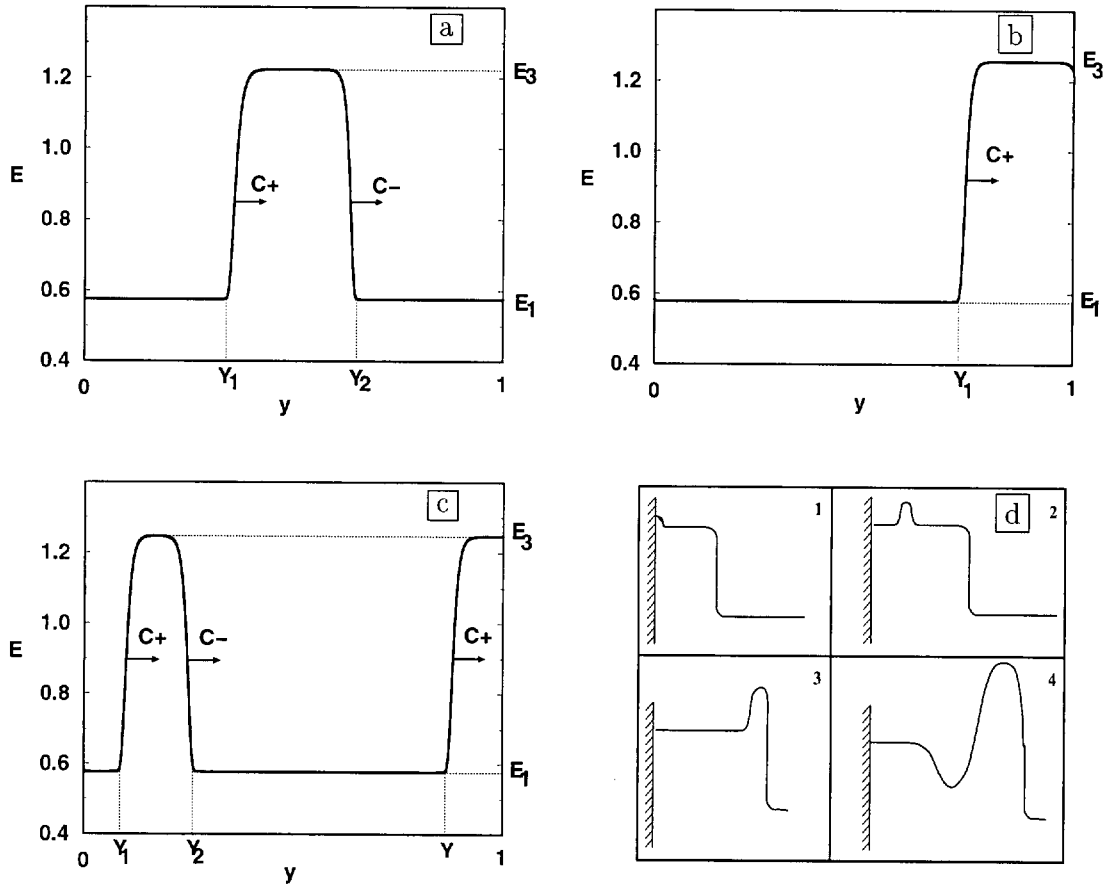
mientras que su separación está relacionada con el voltaje constante  $\phi$  a través de (4.44). Podemos encontrar una ecuación para  $J$  diferenciando (4.44) e insertando (4.45) en el resultado, obteniendo:

$$\frac{dJ}{ds} = \frac{(E_3 - E_1)^2}{\frac{\phi - E_1}{j'_3} + \frac{E_3 - \phi}{j'_1}} (c_+ - c_-) \quad (4.46)$$

donde  $j'_i \equiv \partial j'[E_i(J)]/\partial s$ . Esta es una ecuación cerrada simple para  $J$ , demostrando que  $J$  tiende a  $J^*$ , (para el cual  $c_+ = c_-$ ), exponencialmente rápido. Después de un cierto tiempo, el frente de onda  $Y_2$  alcanza el valor unidad, (es decir, alcanza el extremo derecho correspondiente al cátodo), teniendo un nuevo estado gobernado por (4.43) con  $Y_2 = 1$  e  $Y_1$  definido por (4.44), ver Figura 4.6-(b). La ecuación para  $J$  llega a ser:

$$\frac{dJ}{ds} = \frac{(E_3 - E_1)^2}{\frac{\phi - E_1}{j'_3} + \frac{E_3 - \phi}{j'_1}} c_+ > 0 \quad (4.47)$$

y  $J$  aumenta hasta que sobrepasar el valor  $J_c$  tal que  $E_2(J_c) = \rho J_c$ , en algún tiempo  $s = s_1$ . Pasado este tiempo, la capa límite cerca de  $y = 0$  deja de ser cuasi-estacionaria. De hecho, en este tiempo comienza un nuevo estado en el que la capa límite llega a ser inestable, (ver Sección 4.5), y comienza la generación de una nueva onda solitaria en la escala del tiempo rápido  $\tau = (s - s_1)/\epsilon$ . Entre tanto, la densidad de corriente alcanza su máximo y decrece de nuevo hasta el valor  $J = J_c$ . Durante este nuevo estado, se genera una nueva onda solitaria en  $y = 0$ , proceso que será descrito en la siguiente sección. Si llamamos  $\tau_2 > 0$  al tiempo rápido



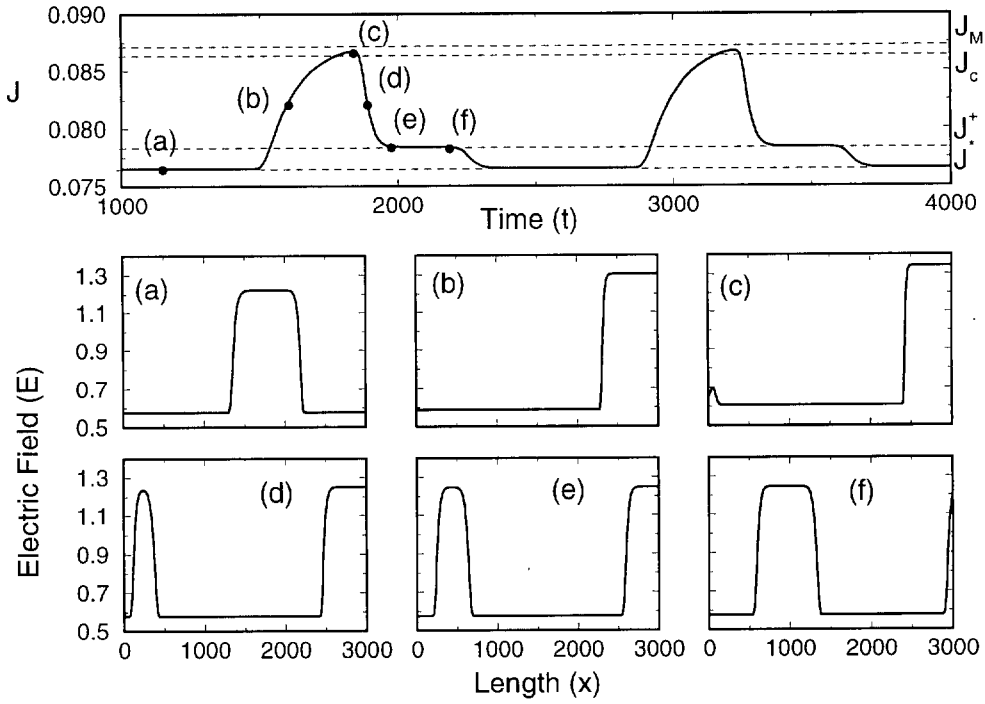
**Figura 4.6:** Estados del proceso correspondientes al análisis asintótico. (a) Una única onda solitaria viaja en una posición suficientemente lejos de los contactos. (b) La onda solitaria llega al extremo opuesto. (c) La onda vieja continúa desapareciendo, mientras una nueva onda totalmente formada se desplaza. (d) Secuencia esquemática del proceso rápido de generación de una nueva onda.

en el cual, la onda solitaria está totalmente formada y el campo eléctrico interior es  $E_3(J)$  y el exterior  $E_1(J)$ . Los frentes de onda encerrando la región de campo alto, están centrados en  $y = Y_3$  e  $y = Y_4$ , con  $Y_3 < Y_4$ . Se produce entonces un nuevo estado lento, durante el cual, el perfil de campo eléctrico es:

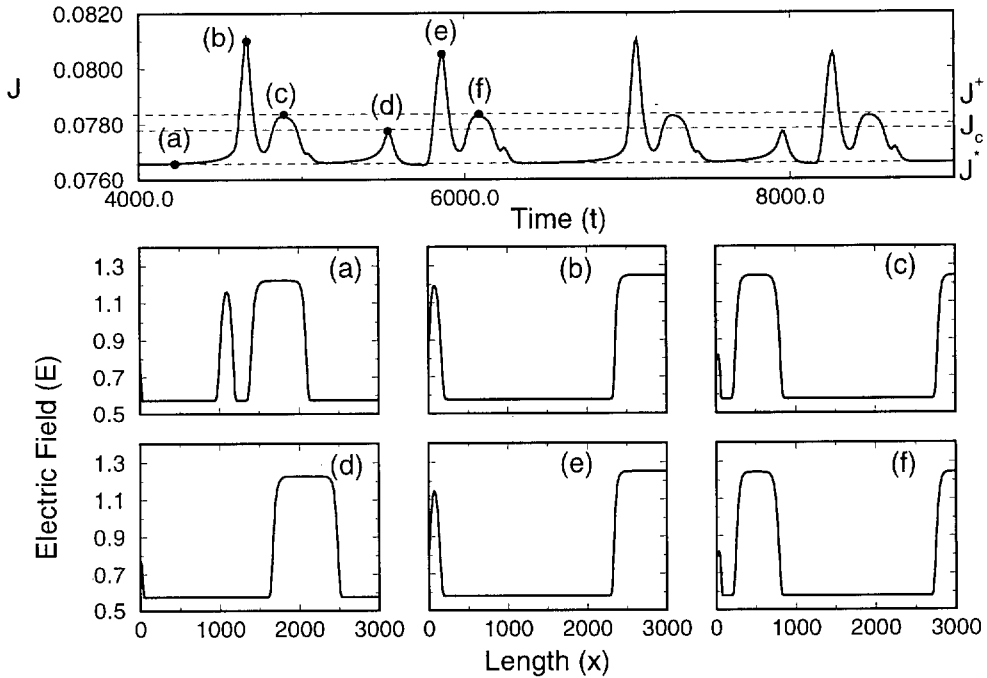
$$\phi = E_1(J) + [E_3(J) - E_1(J)](1 - Y_1 + Y_4 - Y_3) + O(\epsilon), \quad (4.48)$$

(suponiendo que  $\phi$  es lo suficientemente grande para que la posición de la onda vieja se tenga  $Y_1(s) < 1$ ). Diferenciando (4.48) con respecto a  $s$  y sabiendo que  $Y_1$  e  $Y_3$  se mueven con velocidad  $c_+(J)$  mientras que  $Y_2$  se mueve con velocidad  $c_-(J)$ , (ver Figura 4.6-(c)), se obtiene:

$$\frac{dJ}{ds} = \frac{(E_3 - E_1)^2}{\frac{\phi - E_1}{j'_3} + \frac{E_3 - \phi}{j'_1}} (2c_+ - c_-). \quad (4.49)$$



**Figura 4.7:** Solución numérica del modelo reducido durante un período de la oscilación, en el caso estable  $2c_+(J_c) < c_-(J_c)$ , en el cual sólo se genera una nueva onda por período. El valor de los parámetros de la simulación son:  $L = 3000$ ,  $\rho = 7.49736$ ,  $\phi = 0.749565$ .



**Figura 4.8:** Solución numérica del modelo reducido durante un período de la oscilación, en el caso inestable  $2c_+(J_c) > c_-(J_c)$ , correspondiente a  $\rho = 10$ , siendo el resto de los parámetros iguales a los dados en la Figura 4.7. Con estos valores, se generan dos nuevas ondas en cada período.

Existen ahora dos posibilidades: (i)  $(2c_+ - c_-) < 0$  y entonces  $J$  decrece hasta alcanzar el valor  $J^\dagger$  donde  $2c_+(J^\dagger) - c_-(J^\dagger) = 0$ , (de nuevo para voltajes lo suficientemente grandes para que en la onda vieja  $Y_1(s) < 1$ ), ver Figura 4.7; (ii)  $(2c_+ - c_-) > 0$  y se genera(n) una(s) nueva(s) onda(s), ver Figura 4.8. En la Figura 4.5-(d) se muestran de forma gráfica la disposición de las densidades de corriente  $J^*$ ,  $J_c$ ,  $J^\dagger$  en ambos casos. Vamos a considerar únicamente aquí el caso estable (i), que ocurre para un  $J_c > J^\dagger$  suficientemente grande, (o equivalentemente, para resistividad en el contacto  $\rho$  suficientemente pequeña). Como se ha comentado, en este caso  $J(s)$  disminuye exponencialmente rápido hacia  $J^\dagger$ , formándose una meseta cuando el voltaje constante  $\phi$  es suficientemente grande. Después de que la onda vieja alcanza  $y = 1$ , se consigue de nuevo las ecuaciones (4.43) – (4.46), tomando  $Y_3$  e  $Y_4$  los papeles de los previos frentes de onda  $Y_1$  y  $Y_2$ , respectivamente. Así recuperamos la situación inicial y se completa un periodo completo de la oscilación Gunn.

## 4.5 Generación de Nuevas Ondas en la Capa de Inyección

Después de que la densidad de corriente sobrepasa el valor  $J_c$  en  $s = s_1$ , comienza un nuevo estado durante el cual se genera una nueva onda en la capa de inyección, ver Figura 4.6-(d). Para comprender cómo la solución cuasi-estacionaria de la capa de inyección llega a ser inestable, produciéndose una nueva onda, es conveniente mantener dos términos en el desarrollo externo de la solución, ya que el término dominante de la capa de inyección en la condiciones de voltaje constante, es de segundo orden. La estabilidad de la capa de inyección está gobernada por unas ecuaciones similares a las que producen las soluciones estacionarias [BCBT94, BHV94], excepto que la onda vieja, localizada en  $y = Y(s_1)$ , necesita ser tomada en cuenta en el perfil cuasi-estacionario externo. El criterio de estabilidad en este caso, establece que la capa de inyección llega a ser inestable cuando  $F \sim E_2(J_c)$ , sobre un intervalo de anchura  $O(\epsilon \ln \epsilon)$ , próximo a  $y = 0$ .

La escala de tiempo apropiada para este estado de generación es  $\tau = (s - s_1)/\epsilon$ , de tal forma que durante este estado, la posición del frente de onda viejo es  $Y_1 \sim Y_1(s_1) + \epsilon c_+ \tau$ . Los desarrollos, son en este caso:

$$\begin{aligned} E &= E^{(0)}(y, \tau) + \epsilon E^{(1)}(y, \tau) + O(\epsilon^2) \\ A &= A^{(0)}(y, \tau) + \epsilon A^{(1)}(y, \tau) + O(\epsilon^2) \\ J &= J_c + \epsilon J^{(1)}(\tau) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (4.50)$$

de las ecuaciones (4.29) y (4.30), se encuentra que el término de orden dominante  $E^{(0)}(y, \tau)$  está dado por (4.43) con  $Y_1 \sim Y_1(s_1) + \epsilon c_+ \tau$ ,  $Y_2 = 1$ , y  $J = J_c$ . Después de algo de álgebra, las ecuaciones para  $E^{(1)}$  y  $A^{(1)}$  se convierten en:

$$E^{(1)} = \frac{V_i}{J_c V_i'} (J^{(1)} - V_i A^{(1)}), \quad (4.51)$$

$$\frac{\partial A^{(1)}}{\partial \tau} + \frac{K_i + R_i}{V_i'} j_i' A^{(1)} = \frac{K_i + R_i}{V_i^2 V_i'} (j_i' V_i - J_c V_i') J^{(1)}. \quad (4.52)$$

En estas ecuaciones, las funciones del perfil externo del campo eléctrico son constantes a trozos, por ejemplo,  $V = V(E_1) \equiv V_1$  si  $0 < y < Y_1(s_1)$  y  $V = V(E_3) \equiv V_3$  si  $Y_1(s_1) < y < 1$ .

El subíndice  $i$  es 1 o 3 de acuerdo con el valor de  $y$ . Las soluciones que no aumentan exponencialmente como  $\tau \rightarrow -\infty$ , de forma que puedan ser acopladas con el estado previo, son:

$$E_i^{(1)} = \frac{V_i}{J_c V_i'} J^{(1)}(\tau) - \frac{\mu_i (j_i' V_i - J_c V_i')}{J_c V_i' j_i'} \times \int_{-\infty}^{\tau} e^{-\mu_i (\tau-t)} J^{(1)}(t) dt. \quad (4.53)$$

donde:

$$\mu_i = \frac{(K_i + R_i) j_i'}{V_i'}, \quad i = 1, 3, \quad (4.54)$$

$i = 1$  si  $0 < y < Y_1(s_1)$  e  $i = 3$  si  $Y_1(s_1) < y < 1$ ). La expresión para  $A^{(1)}$  se obtiene inmediatamente de (4.51) y (4.53).

Las ecuaciones en la capa de inyección son (4.29) y (4.30) con  $J = J_c + \epsilon \rho J^{(1)}(\tau) + O(\epsilon^2)$ , mientras que la condición de frontera es  $F(0, \tau) = E_2(J_c) + \epsilon \rho J^{(1)}(\tau) + O(\epsilon^2)$ . Para determinar  $J^{(1)}(\tau)$ , se sustituye el perfil del campo externo (4.50) en la condición de voltaje constante (4.19). El resultado es:

$$\begin{aligned} \phi = & E_1(J_c) + [E_3(J_c) - E_1(J_c)] [1 - Y_1(s_1)] + \epsilon \left\{ E_1^{(1)} + [E_3^{(1)} - E_1^{(1)}] [1 - Y_1(s_1)] \right. \\ & - [E_3(J_c) - E_1(J_c)] c_+ \tau + \int_0^{\infty} [F(x, \tau) - E_1(J_c)] dx + \int_{-\infty}^0 [F(\chi) - E_1(J_c)] d\chi \\ & \left. + \int_0^{\infty} [F(\chi) - E_3(J_c)] d\chi \right\} + O(\epsilon^2) \quad (4.55) \end{aligned}$$

Si definimos:

$$\begin{aligned} h(\tau) = & [E_3(J_c) - E_1(J_c)] c_+ \tau - \int_0^{\infty} [F(x, \tau) \\ & - E_1(J_c)] dx - \int_{-\infty}^0 [F(\chi) - E_1(J_c)] d\chi - \int_0^{\infty} [F(\chi) - E_3(J_c)] d\chi \quad (4.56) \end{aligned}$$

que representa el área perdida por el movimiento de la vieja onda  $Y_1$  durante el tiempo  $\tau$ , menos el exceso de área bajo la capa de inyección. Si incluimos en el orden dominante del campo eléctrico externo los dos términos de (4.55), que representan el exceso de área en la capa de transición en  $Y_1$ , e insertando (4.53) en el resultado, se obtiene:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{V_1 Y_1(s_1)}{J_c V_1'} + \frac{V_3 [1 - Y_1(s_1)]}{J_c V_3'} \right] J^{(1)}(\tau) - \frac{\mu_1 Y_1(s_1)}{J_c V_1' j_1'} (j_1' V_1 - J_c V_1') \int_{-\infty}^{\tau} e^{-\mu_1 (\tau-t)} J^{(1)}(t) dt \\ - \frac{\mu_3 [1 - Y_1(s_1)]}{J_c V_3' j_3'} \times (j_3' V_3 - J_c V_3') \int_{-\infty}^{\tau} e^{-\mu_3 (\tau-t)} J^{(1)}(t) dt = h(\tau) \quad (4.57) \end{aligned}$$

Después de algunas manipulaciones elementales, podemos transformar esta ecuación integral para  $J^{(1)}$  en una ecuación diferencial ordinaria lineal de segundo orden, que puede ser resuelta directamente bajo la condición de que la solución no aumente cuando  $\tau \rightarrow -\infty$ . Se obtiene entonces:

$$J^{(1)}(\tau) = \frac{h(\tau)}{a_1} + \int_0^\infty G(\sigma) \frac{h(\tau - \sigma)}{a_1} d\sigma \quad (4.58)$$

$$G(\sigma) = \frac{(\lambda_1 + \mu_1)(\lambda_1 + \mu_3)e^{\lambda_1\sigma} - (\lambda_2 + \mu_1)(\lambda_2 + \mu_3)e^{\lambda_2\sigma}}{\lambda_1 - \lambda_2} \quad (4.59)$$

Aquí  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  son las raíces negativas del polinomio cuadrático:

$$a_1\lambda^2 + a_2\lambda + a_3 \quad (4.60)$$

cuyos coeficientes son:

$$a_1 = \frac{V_1 Y_1(s_1)}{J_c V_1'} + \frac{V_3 [1 - Y_1(s_1)]}{J_c V_3'} \quad (4.61)$$

$$a_2 = \mu_1 \left( \frac{Y_1(s_1)}{j_1'} + \frac{V_3 [1 - Y_1(s_1)]}{J_c V_3'} \right) + \mu_3 \left( \frac{V_1 Y_1(s_1)}{J_c V_1'} + \frac{1 - Y_1(s_1)}{j_3'} \right) \quad (4.62)$$

$$a_3 = \mu_1 \mu_3 \left( \frac{Y_1(s_1)}{j_1'} + \frac{1 - Y_1(s_1)}{j_3'} \right) \quad (4.63)$$

La ecuación (4.58) se puede reescribir, de forma que se obtenga una interpretación más transparente, de la siguiente forma:

$$J^{(1)}(\tau) = J'(s_1)(\tau - \tau_0) - I(\tau) - \int_0^\infty G(\sigma) I(\tau - \sigma) d\sigma \equiv J'(s_1)(\tau - \tau_0) - \tilde{I}(\tau) \quad (4.64)$$

donde  $J'(s_1)$  está dado por (4.47) con  $J = J_c$  y siendo  $G(\sigma)$  el núcleo de (4.59). Por otra parte, los valores de  $I$  y  $\tau_0$ , están dados por las siguientes expresiones:

$$I(\tau) = a_1^{-1} \int_0^\infty [F(x, \tau) - E_1(J_c)] dx \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} \tau_0 = & \frac{1}{(E_3 - E_1)_{c+}} \left\{ \int_{-\infty}^0 [F(\chi) - E_1(J_c)] d\chi + \int_0^\infty [F(\chi) - E_3(J_c)] d\chi \right. \\ & \left. + \frac{J'(s_1)}{(E_3 - E_1)_{c+}} \times \left[ \frac{[1 - Y_1(s_1)](j_3' V_3 - J_c V_3')}{J_c \mu_3 V_3' j_3'} + \frac{Y_1(s_1)(j_1' V_1 - J_c V_1')}{J_c \mu_1 V_1' j_1'} \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.66)$$

Los términos del lado derecho de (4.64), muestran claramente el balance entre el área perdida por el movimiento del frente de onda viejo en  $Y_1(s)$ , y el área de exceso bajo la capa de inyección.



En resumen, se necesita resolver la siguiente ecuación para el campo en la capa de inyección:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x \partial \tau} + \frac{[J_c + \epsilon J^{(1)}(\tau)] [K(F) + R(F)]}{V(E)^2} \times \left( \frac{V'(F)}{K(F) + R(F)} \frac{\partial F}{\partial t} + V(F) \frac{\partial F}{\partial x} + j(F) - J_c - \epsilon J^{(1)}(\tau) \right) = \epsilon \frac{1}{V(F)} \frac{dJ^{(1)}}{d\tau} \quad (4.67)$$

o equivalentemente, el sistema:

$$\frac{\partial A}{\partial \tau} = \frac{[J_c + \epsilon J^{(1)}(\tau)] [K(E) + R(E)]}{V(E)^2} \times [j(E) - V(E) A], \quad (4.68)$$

$$\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{J_c + \epsilon J^{(1)}(\tau)}{V(E)} - A, \quad (4.69)$$

para  $A$  y  $E = F(x, \tau)$ , con la siguiente condición frontera:

$$F(0, \tau) = \rho [J_c + \epsilon J^{(1)}(\tau)]. \quad (4.70)$$

Aquí,  $J^{(1)}(\tau)$  está dado por (4.58) como un funcional de la función  $h(\tau)$  o por (4.64) como un funcional del exceso de área bajo la capa de inyección,  $I(\tau)$ . Además de resolver este problema, la solución  $F(x, \tau)$  necesita satisfacer la condición de empalme:

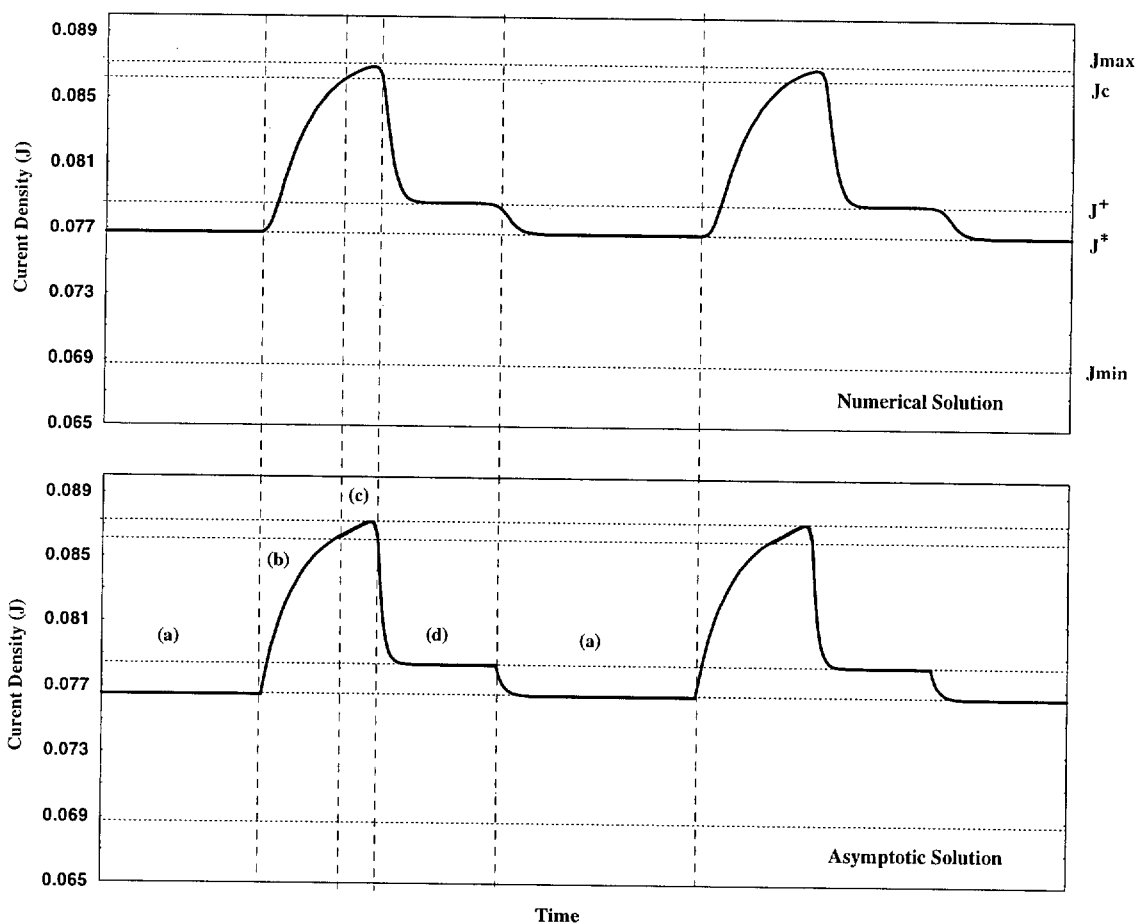
$$F(x, \tau) - F_0(x; J(s)) \ll \epsilon, \quad (4.71)$$

cuando  $s \rightarrow s_1-, \tau \rightarrow -\infty$  en un dominio de superposición apropiado.  $F_0(x; J(s))$  es la solución de la capa límite cuasi-estacionaria de (4.41) y (4.40) para  $s < s_1$ , siendo  $J(s_1) = J_c$ , con  $J(s)$  dado por (4.47). Se ha mantenido el término  $O(\epsilon)$  en (4.70) debido a que éste, llega a ser de orden unidad después de que se forman el o los nuevos frentes de ondas. Las ecuaciones (4.67) - (4.71) constituyen un problema significativo, que puede ser resuelto numéricamente, (ver Figura 4.6-(d)), o mediante un estudio analítico. Hay que destacar que el término forzante en la frontera, proporcional a  $J^{(1)}(\tau)$ , es un funcional de  $h(\tau)$ , que representa el área perdida cuando la onda vieja se mueve hacia  $y = 1$ , menos el área ganada debido al crecimiento del campo en la capa de inyección. La presente discusión se puede utilizar para hacer observaciones precisas de Higuera y Bonilla en la creación de una nueva onda en el modelo usual del efecto Gunn, (ver Sección 5 de [HB92]). Anticipando la creación de nuevos frentes de onda cerca de  $y = 0$ , se decide definir su posición en la escala espacial lenta por  $Y_i = \epsilon X_i$  ( $i = 3, 4$ ),  $X_3 < X_4$ , tal que:

$$F(X_3(\tau), \tau) = e_0 := \frac{E_2(J_c) + E_3(J_c)}{2}, \quad (4.72)$$

$$F(X_4(\tau), \tau) = E_0 := \frac{E_1(J_c) + E_2(J_c)}{2}. \quad (4.73)$$





**Figura 4.9:** Comparación entre los resultados de la simulación numérica directa y la aproximación asintótica al orden dominante, para los mismos valores de los parámetros de la Figura 4.7

Los resultados de nuestra simulación se muestran en la Figura 4.9. Cuando  $F(x, \tau)$  está suficientemente cerca de  $E_3[J(\tau)]$  en algún intervalo espacial, se considerará que el estado rápido de la generación ha terminado. Las posiciones de los nuevos frentes de onda  $Y_3$  y  $Y_4$  y el valor de la densidad de corriente, se pueden utilizar como condiciones iniciales para el siguiente estado lento con tres frentes de onda, como se describió en la Sección 4.4.3.

